

Titre: Modélisation numérique de l'évolution microstructurale pendant la
Title: solidification équiaxe

Auteur: Stéphane Bergeron
Author:

Date: 1998

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Bergeron, S. (1998). Modélisation numérique de l'évolution microstructurale
Citation: pendant la solidification équiaxe [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de
Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/6875/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie:
PolyPublie URL: <https://publications.polymtl.ca/6875/>

**Directeurs de
recherche:**
Advisors:

Programme: Non spécifié
Program:

NOTE TO USERS

This reproduction is the best copy available

UMI

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION NUMÉRIQUE DE L'ÉVOLUTION
MICROSTRUCTURALE PENDANT LA
SOLIDIFICATION ÉQUIAXE

STÉPHANE BERGERON
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE MÉCANIQUE)
Avril 1998

© Stéphane Bergeron, 1998.



National Library
of Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque nationale
du Canada

Acquisitions et
services bibliographiques

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

0-612-38659-7

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

MODÉLISATION NUMÉRIQUE DE L'ÉVOLUTION
MICROSTRUCTURALE PENDANT LA
SOLIDIFICATION ÉQUIAXE

présenté par: BERGERON Stéphane

en vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès sciences appliquées
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. PRUD'HOMME Michel, Ph.D., président

M. NGUYEN T. Hung, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. HÉTU Jean-François, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. LOONG Chee-Ang, Ph.D., membre

DÉDICACE

À mes parents, par leur sens des valeurs et leur affection, ils ont su me donner les ingrédients nécessaires pour mener à bien ce travail. À ma femme, pour sa présence et ses encouragements et à mes enfants pour tout ce qu'ils m'apportent.

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier les responsables de la section Modélisation et optimisation de procédés de l'Institut des matériaux industriels à Boucherville pour m'avoir appuyé dans la réalisation de ce projet.

Toute ma gratitude va également à ma famille pour son support et ses encouragements pendant ces quelques années.

J'aimerais exprimer aussi ma reconnaissance à ceux qui ont contribué, de près ou de loin, à l'achèvement de ce travail. Je tiens également à remercier mon directeur, T. Hung Nguyen et codirecteur de projet, Jean-François Héту pour leurs précieux conseils ainsi que Richard Aubert, qui m'a conseillé au niveau programmation et Danielle Dufresne pour l'aide qu'elle m'a apportée.

RÉSUMÉ

Depuis quelques années, d'importants développements en termes de coût, de rapidité et de capacité d'ordinateurs ont provoqué une stimulation nouvelle concernant la modélisation de la solidification. Des méthodes de calculs améliorées ont permis d'accéder plus rapidement aux résultats de la simulation numérique, de simuler des pièces plus complexes et aussi de prédire d'autres paramètres complémentaires dont la microstructure.

Dans ce mémoire, le processus complet de la modélisation équiaxe est modélisé. Premièrement, les principes de base régissant la solidification sont décrits puis, les différents modèles utilisés pour déterminer les phénomènes de transfert de chaleur et de solidification des métaux purs et des alliages sont présentés. Ce mémoire présente également une revue exhaustive des modèles utilisés pour prédire la microstructure et les paramètres associés comme la taille des grains, l'espacement interdendritique et la microségrégation. Par la suite, les différentes formulations mathématiques associées aux modèles macroscopiques sont données. Ces modèles sont utilisés pour prédire les profils isothermes et les zones de dernière solidification (fraction de solide) permettant de prévoir les zones probables de macroretassures. De nombreux modèles décrivant la cinétique de germination, de croissance et d'empiétement des grains sont appliqués à la formulation macroscopique. Plus particulièrement, les travaux ont porté sur la modélisation des structures dites équiaxes appliqués aux procédés de moulage.

Un des objectifs principaux de ce mémoire est de présenter les principes fondamentaux reliés à la formulation du terme source dans les équations

d'échange de chaleur. Dans cette formulation, la variation de la fraction de la phase solidifiée est directement liée aux paramètres microstructuraux. Pour ce faire, une portion du programme CastSol et le post-processeur CastView, développés à l'Institut des matériaux industriels, seront utilisés pour décrire l'aspect macroscopique du problème. CastSol utilise la méthode des éléments finis pour discrétiser le domaine et le couplage micro-macroscopique a été réalisé à l'aide de l'approche chaleur latente. Finalement, la modélisation de la solidification d'une fonte hypoeutectique, effectuée sur trois cas tests a permis de valider le code et les modèles utilisés.

Premièrement, la solidification d'un barreau et d'un lingot monodimensionnel, comparée à d'autres résultats numériques et expérimentaux, permet de constater la précision des modèles et de suivre l'évolution des différents paramètres microstructuraux dans le temps. L'implantation de quelques modèles complémentaires permet également de prédire les propriétés mécaniques finales de la pièce comme la contrainte ultime, la limite d'élasticité et la dureté.

Deuxièmement, la robustesse du code et l'influence de quelques paramètres de calcul comme la taille du maillage et le pas de temps ont été testées à partir de la solidification d'une pièce moulée au sable comportant plusieurs cylindres de diamètres différents. Il a été démontré que ces facteurs jouent un rôle prédominant dans l'interprétation et la précision des résultats.

La modélisation microstructurale ne prétend pas résoudre tous les problèmes en matière de qualité de pièces moulées mais apporte de nouveaux outils aux fondeurs et dessinateurs de moules afin d'éliminer les défauts potentiels avant même la réalisation de la première pièce.

ABSTRACT

In the last few years, some important new developments with regards to computer capabilities, speed and cost have resulted in an increased stimulation concerning numerical modelling of the solidification stage of metal casting parts. Improved computational methods have allowed to simulate more complex parts, obtain simulation results much quicker and predict complementary parameters such as microstructure.

In this thesis, the complete process for equiaxed modelization is presented. First, the basic principles of solidification are presented, followed by the different models used to evaluate heat transfer and solidification phenomena's of pure metals and alloys. An extensive (detailed) review of the models used to predict microstructure and associated parameters such as cell size, interdendritic spacing and microsegregation is also given.

Following this, various various mathematical formulations associated with macroscopic models are presented. These models are used to predict the isothermal profiles and regions of last solidification (solid fraction), allowing to highlight probable areas of macroshrinkage.

Numerous models describing the nucleation, growth and grain impingement kinetics are applied to macroscopic formulation. This work in particular, is oriented towards the modelization of equiaxed structures as applied to casting processes.

One of the main objectives of this thesis is to present the fundamental principles related to the formulation of the heat source component in heat transfer equations. In this formulation, the variation in percentage of the

solidified phase is directly related to microstructural parameters. The CastSol calculation program and the CastView post-processor developed at the Industrial Materials Institute have been used to describe the macroscopic behavior of the problem. CastSol uses the finite element method to discretize the domain, and the micro-macroscopic coupling has been implemented using the latent heat approach. Finally, two test cases modelling the solidification of a hypoeutectic cast iron were used to validate the code as well as the models used.

In the first case the comparison of the solidification of a unidimensional ingot with other numerical and experimental results allows the precision of the models to be validated. The evolution of microstructural parameters with time are also followed. The implementation of some complementary models can predict the final mechanical properties of the part such as ultimate strength, elastic limit and hardness.

In the second case, the robustness of the code and the influence of parameters such as mesh size and time step have been tested using solidification of a sand cast part incorporating several cylinders of various diameters. It has been demonstrated that these factors have a predominant role in the interpretation and precision of results.

Microstructural modelization does not solve all problems associated to molded parts but it does provide foundrymen and mould designers with new tools which can be used to identify potential defects before the first part is even produced.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	viii
LISTE DES TABLEAUX	xii
LISTE DES FIGURES	xiii
LISTE DES SYMBOLES	xvi
INTRODUCTION	1
CHAPITRE I RECHERCHE BIBLIOGRAPHIQUE	5
1.1 Structures de solidification	6
1.1.1 Morphologie des grains	6
1.2 Principe de la redistribution du soluté - modèles de diffusion	10
1.2.1 Solidification à l'équilibre (règle du levier)	10
1.2.2 Solidification sans diffusion dans la phase solide (modèle de Scheil)	13
1.2.3 Solidification avec diffusion limitée ou incomplète dans la phase solide (modèle de diffusion inverse)	15
1.2.4 Limites des modèles macroscopiques	17
1.3 Cinétique de transformation des structures équiaxes	18
1.3.1 Cinétique de germination	21
1.3.2 Cinétique de croissance	28
1.3.3 Diffusion du soluté - fraction solide interne du grain	38
1.3.4 Solidification interdendritique et maturation	40
1.3.5 Empiètement des grains	41
1.4 Modélisation de la solidification des alliages à composants multiples	47

1.5 Alliages hypoeutectiques	51
1.6 Prédiction des propriétés mécaniques.....	54
1.7 Synthèse des modèles décrivant la cinétique de transformation.....	55
CHAPITRE II MODÉLISATION MACROSCOPIQUE DU	
TRANSFERT DE CHALEUR	57
2.1 Hypothèses et principes fondamentaux.....	57
2.2 Conditions aux frontières	62
2.3 Méthode numérique.....	62
CHAPITRE III MODÉLISATION MICROSCOPIQUE DES	
STRUCTURES ÉQUIAXES.....	67
3.1 Processus complet de la solidification équiaxe.....	67
CHAPITRE IV ANALYSE DES RÉSULTATS ET DISCUSSION	76
4.1 Barreau monodimensionnel.....	77
4.2 Solidification d'un lingot	81
4.2 Cylindres multiples - solidification étagée	87
CONCLUSION	99
REFERENCES.....	101
ANNEXE A: PROPRIÉTÉS ET PARAMÈTRES UTILISÉS POUR LE	
CALCUL.....	108

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1 Hypothèses utilisées dans les modèles analytiques de micro-ségrégation	17
Tableau 1.2 Sommaire des modèles de germination	27
Tableau 1.3 Coefficients de croissance pour les grains eutectiques équiaxes.....	31
Tableau 1.4 Coefficients de croissance pour les grains dendritiques équiaxes	37
Tableau 1.5 Valeurs critiques pour avoir interaction entre les grains	44
Tableau 4.1 Composition de l'alliage utilisé pour les calculs effectués sur le cylindre monodimensionnel ^{26,58}	76
Tableau 4.2 Caractéristiques des maillages pour la solidification étagée	89
Tableau 4.3 Comparaison des propriétés mécaniques prédites.....	94
avec ceux de Goettsch ⁵⁸	
Tableau 4.4 Comparaison des paramètres microstructuraux avec ceux de Goettsch ⁵⁸	94
Tableau 4.5 Résultats calculés à partir du maillage de 27000 éléments ($\Delta t = 2.0$ secondes)	97
Tableau 4.6 Résultats calculés à partir du maillage de 27000 éléments ($\Delta t = 0.2$ secondes)	97

LISTE DES FIGURES

Figure Intro.1 Procédés de fabrication avec changement de phase. a) solidification d'un lingot; b) moulage d'une forme; c) solidification directionnelle.....	2
Figure Intro.2 Représentation des différents niveaux d'intérêt en modélisation microstructurale	4
Figure 1.1 Alliages typiques de fonderie.....	6
Figure 1.2 Formation des zones structurales dans les procédés de moulage 5,6	8
Figure 1.3 Morphologies de l'interface solide/liquide	9
Figure 1.4 Processus de solidification équiaxe: a) dendritique; b) eutectique	10
Figure 1.5 (a) Diagramme de phase; (b) Profil de concentration à l'interface ¹	11
Figure 1.6 Redistribution du soluté pendant la solidification à l'équilibre (a) au début de la solidification; (b) à la température \tilde{T} ; (c) après la solidification ¹	13
Figure 1.7 Redistribution du soluté pendant la solidification (sans diffusion dans la phase solide). (a) Au début de la solidification; (b) à la température \tilde{T} ; (c) après la solidification ¹	14
Figure 1.8 Courbe de refroidissement d'un alliage de type dendritique équiaxe et diagramme des différentes étapes de solidification ¹⁷	20
Figure 1.9 Organigramme des modèles pour calculer la fraction solide.....	20
Figure 1.10 Représentation des mécanismes de germination continue.....	22
Figure 1.11 Représentation des mécanismes de germination instantanée.....	22
Figure 1.12 Détermination de la densité de grains selon le modèle de Thévoz et a^{fs}	27
Figure 1.13 Structures de grains eutectiques équiaxes.....	29
Figure 1.14 Structures de grains dendritiques équiaxes.....	34

Figure 1.15 Profils de diffusion du soluté selon le profil réel (a) ou calculés analytiquement (b) selon le modèle de Rappaz et Thévoz ²¹	39
Figure 1.16 Projection stéréographique des grains en contact avec le liquide pour l'empilement compact ²⁶	45
Figure 1.17 Projection stéréographique des grains en contact avec le liquide pour l'empilement cubique simple ²⁶	46
Figure 1.18 Évolution de la microstructure d'une fonte grise hypoeutectique pendant la solidification.....	53
Figure 2.1 Schéma descriptif des méthodes de modélisation macroscopique de la solidification ⁵¹ . (a) Solution à deux domaines; (b) Solution à un domaine	60
Figure 2.2 Relation entre la chaleur spécifique équivalente, l'enthalpie volumique et la température pour le cas d'un alliage binaire Al - Si ⁵²	66
Figure 3.1 Processus de calcul à deux pas temps	71
Figure 3.2 Organigramme de la modélisation macroscopique pour les structures équiaxes eutectiques et dendritiques	73
Figure 3.3 Organigramme de la modélisation microscopique pour les structures équiaxes eutectiques.....	74
Figure 3.4 Organigramme de la modélisation microscopique pour les structures équiaxes dendritiques	75
Figure 4.1 Prédiction de quelques paramètres microstructuraux: température avec surfusion et recalescence, taille de grain, fraction solide et vitesse de croissance ($x = 75 \text{ mm}$)	78
Figure 4.2 Prédiction de quelques paramètres microstructuraux: température avec surfusion et recalescence, la température d'équilibre eutectique et la concentration en silicium du liquide à l'interface ($x = 75 \text{ mm}$).....	79

Figure 4.3 Prédiction de quelques paramètres microstructuraux: fraction solide en fonction de la température ($x = 75$ mm).....	79
Figure 4.5 Géométrie du cylindre monodimensionnel (Longueur = 120 mm, Diamètre = 50 mm)	81
Figure 4.6 Conditions aux limites imposées sur les extrémités du cylindre.....	83
Figure 4.7 Courbes de refroidissement mesurées par Zou et calculées numériquement	83
Figure 4.8 Comparaison des résultats - rayon de grain.....	85
Figure 4.9 Comparaison des résultats - densité de grain	86
Figure 4.10 Prédiction des propriétés mécaniques.....	86
Figure 4.11 Dimensions des composantes pièce-moule pour la solidification étagée	87
Figure 4.12 Maillage de la pièce en fonte avant le découpage.....	88
Figure 4.13 Maillage du moule en sable avant le découpage.....	88
Figure 4.14 Courbes de refroidissement obtenues avec le maillage raffiné.....	90
Figure 4.15 Distribution de la température dans le moule après 300 secondes.....	91
Figure 4.16 Distribution de la température dans la pièce après 300 secondes.....	91
Figure 4.17 Distribution de la température au liquidus après 60 secondes.....	92
Figure 4.18 Température de transformation à l'eutectique après 60 secondes.....	92
Figure 4.19 Prédiction des propriétés mécaniques pour la solidification étagée	93
Figure 4.20 Influence de la taille du maillage sur les courbes de refroidissement ²⁶	95
Figure 4.21 Comparaison des résultats avec la taille du maillage.....	96
Figure 4.22 Influence du pas de temps sur les paramètres micro/macrosopiques	98

LISTE DES SYMBOLES

Symbole	Description	Unité
a	Nombre adimensionnel de Fourier	[–]
a_0, a_1, a_2	Constante du modèle de Goettsch et Dantzig	[–]
b	Constante du modèle de Nastac et Stefanescu	[–]
bc_j	Éléments du vecteur des conditions aux limites (MEF)	[W]
$\{bc\}$	Vecteur des conditions aux limites	[W]
BHN	Dureté à l'échelle de Brinell	[BHN]
α	Angle défini par le rayon du grain et le rayon critique	[°]
α_{th}	Diffusivité thermique	[m ² /s]
C_o	Concentration initiale en soluté de l'alliage	[%]
$C_{o,i}$	Concentration initiale en élément i	[%]
$\overline{C_o}$	Sommation des $C_{o,i}$	[%]
C_E	Concentration de l'eutectique	[%]
C_j	Concentration de la phase j	[%]
$\overline{C_j}$	Concentration moyenne de la phase j	[%]
\tilde{C}_j	Concentration de la phase j à la température \tilde{T}	[%]
C_o	Concentration initiale de l'alliage	[%]
C_o^i	Concentration initiale de élément i	[%]
C_L^*	Concentration de la phase liquide à la pointe de la dendrite	[%]
$C^{i/j}$	Concentration à l'interface des phases i et j	[%]
ΔC_o	Variation de concentration entre les phases à T_s	[%]
$\Delta C_{L,i}$	Variation de concentration de l'élément i dans le liquide	[%]
c_{max}	Longueur maximale d'une lamelle eutectique	[m]
C_p	Chaleur spécifique massique	[J/Kg°C]
c_{p_i}	Chaleur spécifique volumique de la phase j	[J/m ³ °C]
c_p^e	Chaleur spécifique équivalente	[J/m ³ °C]
$[C_p^e]$	Matrice de chaleur spécifique	[J/m ³ °C]
CE	Carbone équivalent	[%]
δ	Épaisseur de la couche limite de soluté	[m]
δ_D	Fonction de Dirac	[–]

D_j	Coefficient de diffusion dans la phase j	$[m^2/s]$
$D_{L,i}$	Contribution de l'élément i au coefficient de diffusion dans la phase liquide	$[m^2/s]$
ε	Emissivité	$[-]$
η	Rapport entre la diffusivité thermique et le coefficient de diffusion	$[-]$
f_j	Fraction massique de la phase j	$[-]$
f_{inter}	Fraction massique de liquide interdendritique à l'intérieur du grain	$[-]$
$f_{inter,i}$	Fraction de liquide interdendritique associée à l'élément i	$[-]$
$f_{inter,total}$	Sommation de la contribution de $f_{inter,i}$ pour chacun des éléments	$[-]$
f_{aus}	Fraction solide austénitique - alliage hypoeutectique	$[-]$
f_{eut}	Fraction solide de grains eutectiques	$[-]$
f_s	Fraction solide totale	$[-]$
f_g	Fraction massique de grain	$[-]$
Δf_s	Variation de la fraction solide	$[-]$
F, Ψ	Facteur d'empiétement	$[-]$
$fonct$	Fonction	$[-]$
G_c	Gradient de concentration chimique	$[\%/m]$
G_{th}	Gradient thermique	$[^\circ C/m]$
Ω_j	Domaine de la phase j	$[-]$
Ω_c	Supersaturation chimique	$[-]$
Ω_{th}	Supersaturation thermique	$[-]$
$\Omega_{c,i}$	Contribution de l'élément i à la supersaturation chimique	$[-]$
$\Omega_{th,i}$	Contribution de l'élément i à la supersaturation thermique	$[-]$
Ω	Domaine d'intégration élémentaire (MEF)	$[-]$
$g(Z)$	Facteur du modèle analytique de croissance (Thévoz et al.)	$[-]$
h_c	Coefficient de transfert de chaleur par convection	$[W/m^2 \cdot ^\circ C]$
h	Enthalpie volumique	$[J/m^3]$
H	Enthalpie massique	$[J/kg]$
\dot{H}	Énergie thermique	$[W/kg]$
ΔH	Variation d'enthalpie massique due au refroidissement	$[J/kg]$
$\Delta H_f, L$	Chaleur latente massique de fusion	$[J/kg]$
Δh_m	Chaleur latente volumique de fusion pour un métal pur	$[J/m^3]$
$H_0^1(\Omega)$	Espace de Hilbert	$[-]$
$I_v(Pe)$	Fonction d'Ivantsov du nombre de Péclet	$[-]$

k	Coefficient de partage ou de partition entre les phases	[–]
k_i	Coefficient de partage attribué à l'élément i	[–]
\bar{k}	Coefficient de partage équivalent	
κ_j	Conductivité thermique de la phase j	[W/m°C]
ξ	Nombre adimensionnel (modèle de Clyde et Kurz)	[–]
Γ	Domaine d'intégration élémentaire (MEF)	[–]
K_1, K_2, K_3	Constante du modèle d'Olfield, Hunt et de Turnbull respectivement	[–]
K_4	Constante du critère de rupture de Griffith	[–]
K_r	Constante du modèle de Jackson-Hunt	[°C·s/m²]
K_c	Constante du modèle de Jackson-Hunt	[°C·m]
$K_{i,j}^e$	Élément de la matrice de conductibilité (MEF)	[W/°C]
[K]	Matrice de conductibilité (MEF)	[W/°C]
λ_1, λ_2	Espacement interdendritique primaire et secondaire	[m]
λ_E	Espacement interlamellaire eutectique	[m]
l	Longueur caractéristique	[m]
m	Constante du modèle de Nastac et Stefanescu	[–]
m_L	Pente du liquidus provenant du diagramme d'équilibre	[–]
$m_{L,i}$	Pente du liquidus pour les alliages à composantes multiples	[–]
\bar{m}_L	pente du liquidus équivalente	[–]
M	Module de maturation	[m³/s]
$M_{i,j}^e$	Élément de la matrice de masse (MEF)	[m]
μ_1, μ_2	Constantes du modèle de Kanetkar et Stefanescu	[–]
μ_3	Coefficient de croissance eutectique	[–]
μ_4, μ_5	Coefficient de croissance dendritique	[–]
n	Densité de grains	[grains/m³]
\bar{n}	Vecteur normal	[–]
n_o	Densité maximale de grains	[grains/m³]
\dot{n}	Taux de germination	[grains/m³·s]
π	Constante pi (3.14159...)	[–]
Pe_c	Nombre de Péclet chimique	[–]
Pe_{th}	Nombre de Péclet thermique	[–]
ϕ	Constante caractérisant l'espace entre les lamelles	[–]
ϕ_i	Fonction d'interpolation (MEF)	[–]
ϕ_j, v	Fonction test (MEF)	[–]
φ	Unité thermique de diffusion	[m³/kg°C]
q_{conv}	Flux de chaleur par convection	[W/m²]

q_{ray}	Flux de chaleur par rayonnement	[W/m ²]
\dot{q}	Terme source de génération de chaleur (volumique)	[W/m ³]
Q_{micro}	Terme source de génération de chaleur (massique)	[W/kg]
\dot{Q}_j	Terme source de génération de chaleur pour la phase j	[W/kg]
ρ_j	Densité de la phase j	[Kg/m ³]
R	Rayon	[m]
\bar{R}	Rayon moyen	[m]
R_j	Rayon de la composante j	[m]
R_d	Rayon de l'extrémité de la dendrite	[m]
R_e, R_g	Rayon de l'enveloppe du grain équiaxe	[m]
R_{min}, R_{max}	Rayon minimum et maximum	[m]
R_{tot}	Rayon final moyen des grains après solidification	[m]
R_c	Rayon critique selon le modèle de Mullins et Sekerta	[m]
R_{crit}	Rayon critique selon le modèle de Zou	[m]
σ_{ULTIME}	Contrainte ultime	[MPa]
σ_{elas}	Limite d'élasticité	[MPa]
σ^*	Constante de stabilité (modèle de Mullins et Sekerka)	[–]
σ_{SB}	Constante de Stefan-Boltzmann ($5.6703 \cdot 10^{-8}$)	[W/m ² °C ⁴]
S_e	Surface effective autour du grain	[m ²]
$\Delta t, \delta t$	Incrément de temps	[s]
t, τ	Temps	[s]
t_f	Temps de solidification locale	[s]
t_0	Début du calcul par éléments finis	[s]
T	Température	[°C]
T_0	Température initiale	[°C]
T_{amb}	Température ambiante	[°C]
\bar{T}	Température moyenne de l'élément de volume	[°C]
T_L	Température au liquidus	[°C]
T_S	Température au solidus	[°C]
T_E	Température de transformation eutectique	[°C]
T_m	Température de fusion du métal pur	[°C]
T_p	Température de transformation péritectique	[°C]
T_i^e	Éléments du vecteur de température (MEF)	[°C]
T	Temps total de refroidissement	[s]
δT	Variation de température dans le temps	[°C]
ΔT	Surfusion	[°C]

ΔT_o	Intervalle de solidification	[°C]
ΔT_N	Surfusion de germination	[°C]
ΔT_σ	Écart type de la distribution de germination (modèle Thévoz et <i>al.</i>)	[°C]
ΔT_{max}	Surfusion maximale après recalescence	[°C]
ΔT_{th}	Surfusion thermique	[°C]
ΔT_c	Surfusion chimique	[°C]
ΔT_r	Surfusion de courbure	[°C]
ΔT_k	Surfusion de cinétique	[°C]
ΔT_E	Somme de chacune des contributions de la surfusion	[°C]
ΔT_{tot}	Surfusion totale pour alliages à composantes multiples	[°C]
T_N	Température de germination	[°C]
\dot{T}	Vitesse de refroidissement	[°C/s]
Γ	Coefficient de Gibbs-Thomson	[m·°C]
$\Gamma_{S/L}$	Interface solide/liquide	[–]
Γ_c, Γ_I	Domaine d'intégration élémentaire (MEF)	[–]
v_g	Vitesse de croissance moyenne	[m/s]
v_s	Vitesse de la phase solide	[m/s]
v_C	Vitesse du front de solidification colonnaire	[m/s]
ϑ	Sous-espace de l'espace de Hilbert	[–]
\vec{v}	Champs de vitesse de l'écoulement de chaleur	[m/s]
w	Fonction test d'interpolation	[–]
\bar{x}	Position dans l'espace	[m]

Fonctions:

Δ, δ	Variation, incrément
[]	Matrice
{ }	Vecteurs

Indices:

i	Éléments, Al, Fe, C, Si ...
j	Identification des phases, $j = L, S, E, \gamma$...
L	Phase liquide
S, α, β	Phase solide
E	Phase eutectique
γ	Phase austénitique

G	Phase graphitique
x, y, z	Position dans l'espace
c, th	Chimique ou thermique
h	Discret

INTRODUCTION

Calculer le refroidissement et la solidification d'une pièce moulée permet de répondre à une double exigence en matière de conception assistée par ordinateur: améliorer la qualité de la pièce et la productivité, tout en réduisant les délais de mise au point des prototypes. En fonderie, modéliser la solidification vise à supprimer les défauts causés par le retrait de solidification (macro et microretassures) et d'obtenir les caractéristiques physiques et mécaniques optimales (grosseur de grain, microstructure). Ceci est possible, en solutionnant d'abord les équations de conservation énergétique d'un point de vue macroscopique et deuxièmement, en incorporant des modèles reliés à la cinétique de solidification pour prédire la microstructure.

La solidification est un phénomène dans lequel un changement de phase apparaît. Dans l'industrie de transformation des métaux, ce phénomène joue un rôle de premier plan. Parmi les procédés les plus importants impliquant ce phénomène, on retrouve les procédés de moulage, la soudure, les procédés de solidification rapide tels que l'atomisation et la solidification directionnelle. Les procédés de solidification ci-haut mentionnés impliquent une extraction de chaleur provenant de la phase liquide d'une façon plus ou moins contrôlée. L'extraction de chaleur produit un changement du niveau d'énergie des phases liquides et solides selon deux modes^{1,2}.

- 1) Diminution de l'enthalpie du liquide et du solide, due au refroidissement

$$\Delta H = \int C_p dT \quad (1.)$$

- 2) Diminution de l'enthalpie causée par la transformation liquide à solide:

$$\Delta H_f = \text{chaleur latente de fusion} \quad (2.)$$

L'extraction de chaleur est réalisée en imposant un refroidissement au liquide pour créer un flux de chaleur externe.

Le phénomène de la solidification a son importance en industrie à cause de sa principale application: le moulage. La figure Intro.1 illustre quelques procédés de moulage couramment utilisés en industrie. La solidification des métaux purs et des alliages nécessite la compréhension de plusieurs principes fondamentaux comme la thermodynamique, la cinétique de transformation de phase et des phénomènes reliés au transport de la matière.

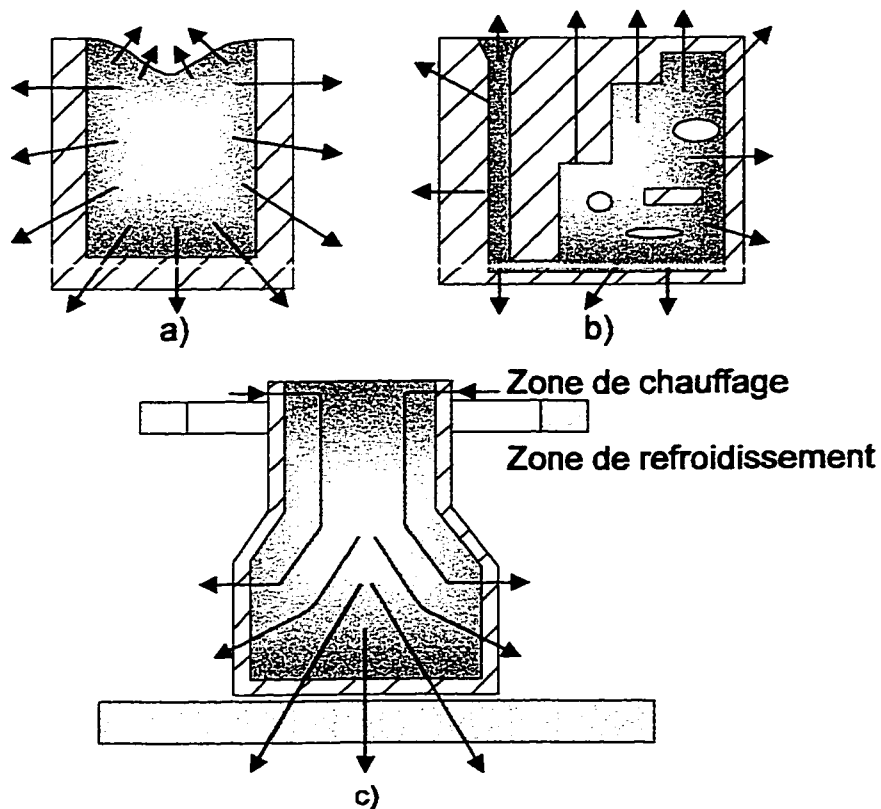


Figure Intro.1 Procédés de fabrication avec changement de phase. a) solidification d'un lingot; b) moulage d'une forme; c) solidification directionnelle

L'aspect de la microstructure se présente sous plusieurs formes. La morphologie dépend notamment du taux de solidification, de la composition de l'alliage initial et du taux de déplacement de l'interface solide/liquide. La figure Intro.2 montre la

morphologie des grains selon le mode de solidification. On distingue deux types de morphologie de base: les structures colonnaires (ou basaltiques) et équiaxes. Dans les structures colonnaires, le taux de croissance du front eutectique ou de la structure dendritique est directement relié à la vitesse de déplacement des isothermes eutectiques ou du solidus. Notons que le mode de croissance de la microstructure en fonderie est principalement caractérisé par la structure dendritique. Pour les structures équiaxes, l'approche est différente du fait que le taux de croissance des grains n'est pas directement relié à la vitesse du front de solidification. Dans ce mémoire, les mécanismes de solidification des structures de type équiaxe seront décrits, en particulier, la cinétique de germination, de croissance et d'empiétement des grains ainsi que les principes de maturation et de diffusion du soluté dans les phases solide et liquide pour le cas des alliages dendritiques. Les mécanismes de solidification généralisés pour les alliages à composantes multiples seront également traités.

Dans la majorité des procédés de moulage, aucune directionnalité n'est imposée concernant le flux de chaleur, mais localement la situation peut être équivalente à une solidification directionnelle (Intro.1c). L'analogie vient du fait que les fronts de solidification, qui se déplacent des parois du moule vers le centre de la cavité, forment dans certains cas une structure colonnaire.

La modélisation de la solidification dans les procédés de moulage implique la description dans le temps et dans l'espace de l'interface solide/liquide. Tel qu'illustré à la figure Intro.2, cette description peut se faire à trois niveaux³:

(1) Échelle macroscopique (macrostructure):

L'échelle macroscopique est de l'ordre du millimètre au mètre et inclut le macro-retrait de solidification, la macro-ségrégation, les fissures ainsi que les dimensions des composantes.

(2) Échelle microscopique (microstructure):

L'échelle microscopique est de l'ordre du micromètre au millimètre et inclut la taille et la structure des grains (colonnaire et équiaxe), l'espacement interdendritique, la micro-ségrégation et la porosité.

(3) Échelle atomique:

L'échelle atomique est de l'ordre du nanomètre. Les connaissances et les ordinateurs actuels ne permettent pas l'utilisation de ce niveau pour des applications industrielles.

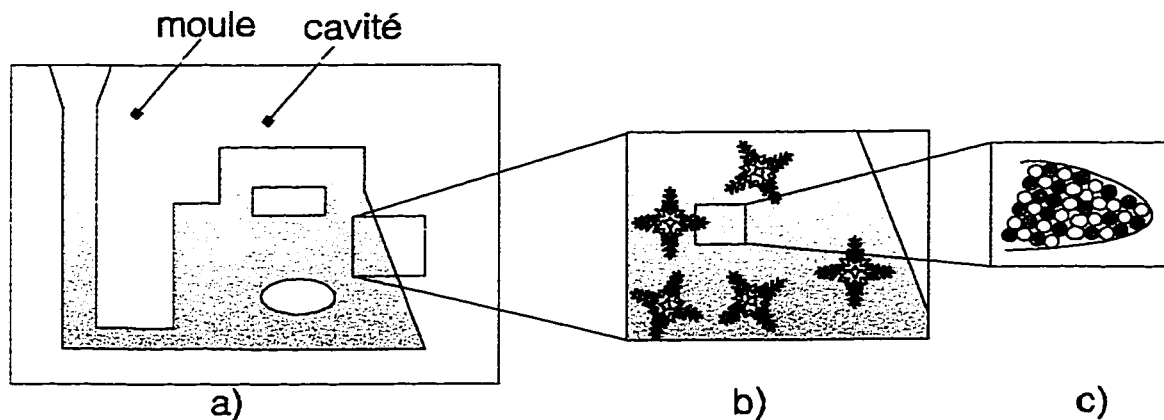


Figure Intro.2 Représentation des différents niveaux d'intérêt en modélisation microstructurale

CHAPITRE I RECHERCHE BIBLIOGRAPHIQUE

Les premières simulations numériques sur ordinateurs remontent aux travaux de Henzel and Keverian⁴ (1959), et d'autres chercheurs américains, qui ont appliqué, à l'étude de pièces encore très simples, des méthodes de différences finies pour décrire le transfert de chaleur en régime transitoire. Ces méthodes, basées sur la discrétisation dans l'espace et dans le temps des équations de Fourier, ont permis d'obtenir l'évolution des températures et d'en déduire les profils de températures, ainsi que les temps de solidification aux noeuds du maillage dans tout le système. La modélisation macroscopique constitue la première génération de modèles utilisés pour décrire la solidification.

Les travaux menés jusqu'aux dernières années avaient porté essentiellement sur l'approfondissement de la connaissance des phénomènes physiques et des méthodes numériques, et les formes abordées étaient assez éloignées des pièces réelles en fonderie. Cela tenait à la fois aux limitations des ordinateurs et à l'absence de logiciels susceptibles de numériser, de mailler et d'effectuer des calculs à partir d'une pièce réelle. Les récentes évolutions dans ces deux domaines ont fait un pas important depuis quelques années permettant d'envisager l'utilisation d'outils plus performants pour décrire la solidification.

La seconde génération de modèles, basée sur la cinétique de transformation de phase, a permis d'accroître l'étendue des applications industrielles. Ces modèles, couplés à l'équation d'énergie, permettent d'obtenir l'évolution microstructurale pendant et après la solidification.

Dans ce chapitre, une description sommaire des principes métallurgiques de base, nécessaire à la compréhension de ce mémoire est donnée suivie d'une revue exhaustive des modèles décrivant la cinétique de transformation des structures équiaxes.

1.1 Structures de solidification

Afin de comprendre l'influence de la composition de l'alliage sur la formation de la microstructure pendant la solidification, le diagramme d'équilibre binaire de la figure 1.1 met en évidence quatre régions ayant chacune ses caractéristiques propres. Ce diagramme permet de définir deux morphologies types: la structure dendritique et eutectique. Ainsi, on distingue: a) les substances pures, qui se solidifient selon un front planaire, b) la structure dendritique solution-solide, c) une structure dendritique combinée à un eutectique interdendritique et d) l'eutectique.

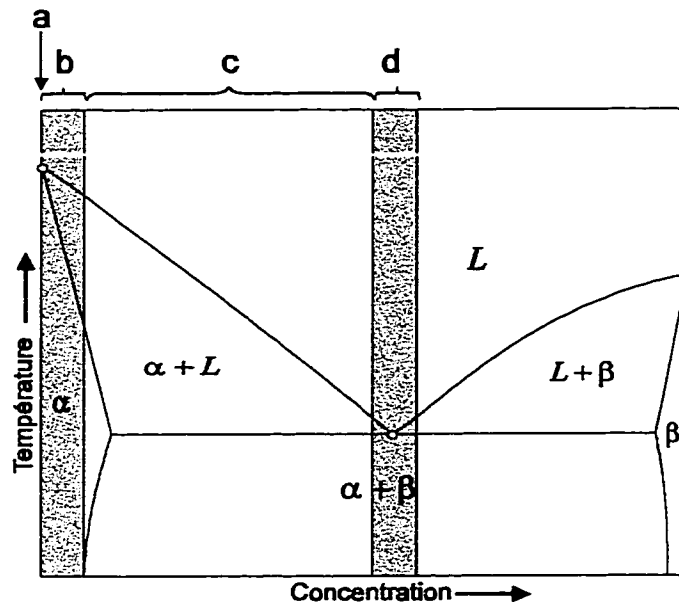


Figure 1.1 Alliages typiques de fonderie

1.1.1 Morphologie des grains

La structure de grain des pièces moulées ou des lingots se présente généralement sous trois formes tel qu'illustrées à la figure 1.2: une zone à grains fins, la zone de peau; une zone intermédiaire et une zone centrale équiaxe. Notons que la théorie relative aux fronts de solidification des métaux est bien décrite dans la littérature (Flemings 1974; Kurz et Fisher 1984). Le taux

d'avancement des fronts de solidification tend à devenir planaire afin de maintenir une configuration d'énergie minimum. Cependant, lorsque le taux de solidification augmente, le front se brise et forme des cellules qui deviennent ensuite une structure dendritique^{1,5}.

La *zone de peau* ou équiaxe fine se forme près des parois du moule lorsque le métal en fusion entre en contact avec le moule dont la température est de loin inférieure à celle du liquidus. Le métal y est aussitôt refroidi pour laisser place à une germination rapide. Les premiers cristaux ainsi formés croissent sans orientation préférentielle.

Une zone intermédiaire, appelée *zone basaltique*, composée d'une structure colonnaire dendritique s'établit rapidement une fois que la zone de peau est formée. Le gradient de température dans le liquide diminue et la distance de surfusion structurale augmente. Dans ce cas-ci, la croissance dendritique se poursuit parallèlement à la direction du flux de chaleur.

Au dernier stade de solidification, la croissance de la structure colonnaire est limitée par la germination de nombreux cristaux provenant de la portion du liquide restant qui est totalement en surfusion, et forme une *zone équiaxe*.

Dans la plupart des cas, une seule de ces zones ou parfois deux seulement sont présentes. Notons que les alliages fer-carbone faiblement alliés présentent souvent trois zones distinctes tandis que les alliages non ferreux moulés en moules métalliques sont généralement sous une forme totalement équiaxe fine car l'extraction de chaleur se fait très rapidement. La présence ou non de ces zones dépend essentiellement de la cinétique de la germination, de la croissance des grains et du degré de convection dans le liquide^{1,5,6}.

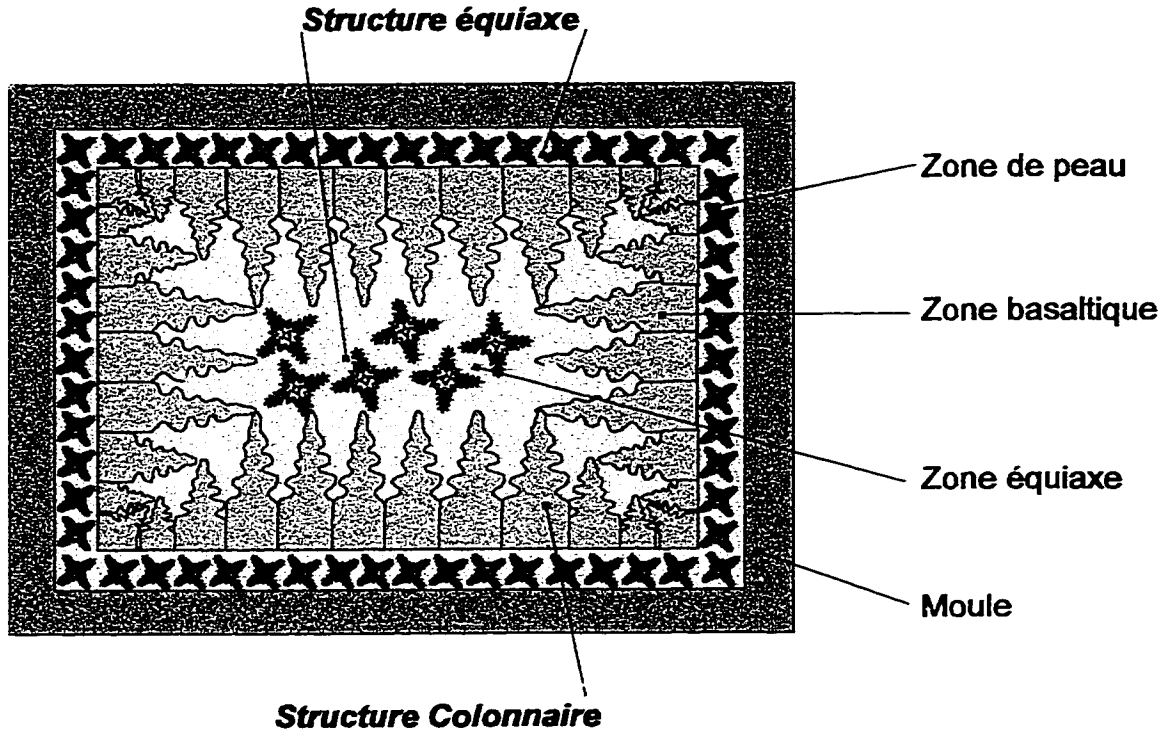


Figure 1.2 Formation des zones structurales dans les procédés de moulage ^{5,6}

a) Structures colonnaires

La morphologie des grains pendant la croissance colonnaire est différente selon le type d'alliage. On retrouve la germination d'une phase solide au sein du liquide (figure 1.3a), la structure planaire (figure 1.3.b), dendritique (figure 1.3.c) et l'eutectique lamellaire (figure 1.3.d).

Dans le cas d'une substance pure, le métal solidifié à partir des parois d'un moule se forme essentiellement selon une interface planaire (figure 1.3b) et croît dans la direction opposée au flux de chaleur. Lorsque des éléments d'alliage ou des impuretés sont présents, la morphologie de la structure colonnaire est généralement dendritique (figure 1.3c).

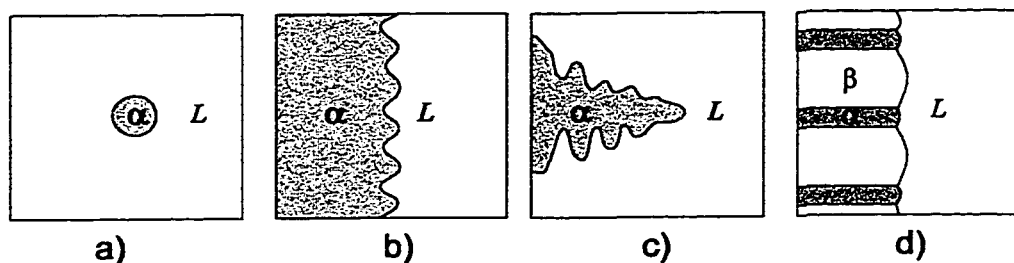


Figure 1.3 Morphologies de l'interface solide/liquide

Le taux de croissance du front eutectique (figure 1.3d) ou de la pointe de la dendrite est directement relié au déplacement du front eutectique ou de l'isotherme du liquidus. Ainsi, certains paramètres microstructuraux de la morphologie colonnaire peuvent être directement prédit à partir des équations d'échange macroscopiques.

b) Structures équiaxes

Comme pour la morphologie colonnaire, la structure équiaxe peut être dendritique ou eutectique (voir les figures 1.4a et 1.4b). Dans les deux cas, lorsque la solidification débute, de simples germes se forment. Puis, dans les alliages et les métaux purs, les germes croissent en des cristaux sphériques et deviennent rapidement instables pour former une structure dendritique. Ces dendrites croissent librement dans le liquide et empiètent finalement sur un autre grain. Après la solidification des métaux purs, les dendrites ne sont pas visibles mais seulement les frontières des grains. Par contre, dans les alliages, les dendrites apparaissent après une simple attaque chimique due à la différence dans la composition locale au sein de la dendrite.

Dans les alliages à composition eutectique, une seconde phase apparaît sur le premier germe formé. Le grain eutectique continue ainsi de croître en gardant sa forme sphérique.

Pour la structure équiaxe, la croissance des bras dendritiques s'effectue selon les 6 faces d'un cube en partant de son centre et le taux de croissance des

grains n'est pas fonction de la vitesse du front de solidification mais plutôt de la densité en grains elle-même.

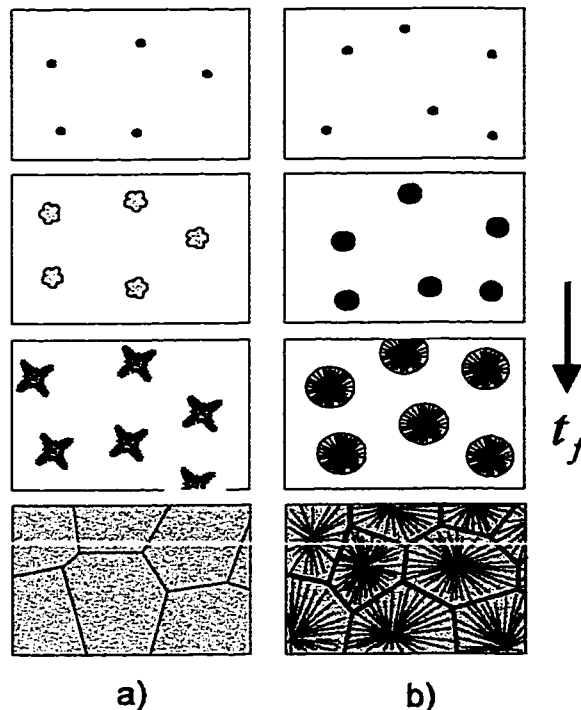


Figure 1.4 Processus de solidification équiaxe: a) dendritique; b) eutectique

1.2 Principe de la redistribution du soluté - modèles de diffusion

Les modèles de diffusion aussi appelés de microségrégation, décrivant la redistribution du soluté, sont applicables autant pour les structures colonnaires que pour les structures équiaxes.

1.2.1 Solidification à l'équilibre (règle du levier)

Très fréquemment, la solidification des métaux est approchée en considérant l'équilibre à l'interface liquide/solide durant la croissance. Cette hypothèse est valide si la diffusion dans la phase solide et liquide est complète. Le gradient de concentration dans ces phases peut être important mais la barrière s'opposant au transport des atomes à travers l'interface demeure négligeable. Considérons

un alliage de composition C_0 . Pendant la solidification, à une température \tilde{T} , les compositions des phases solide et liquide \tilde{C}_s et \tilde{C}_L sont fixées par le diagramme de phase binaire tel que montré à la figure 1.5. Sous ces conditions, on peut définir un coefficient de partition entre les phases¹:

$$k = \frac{\tilde{C}_s}{\tilde{C}_L} = \frac{T_m - T_L}{T_m - T_s} \quad (3.)$$

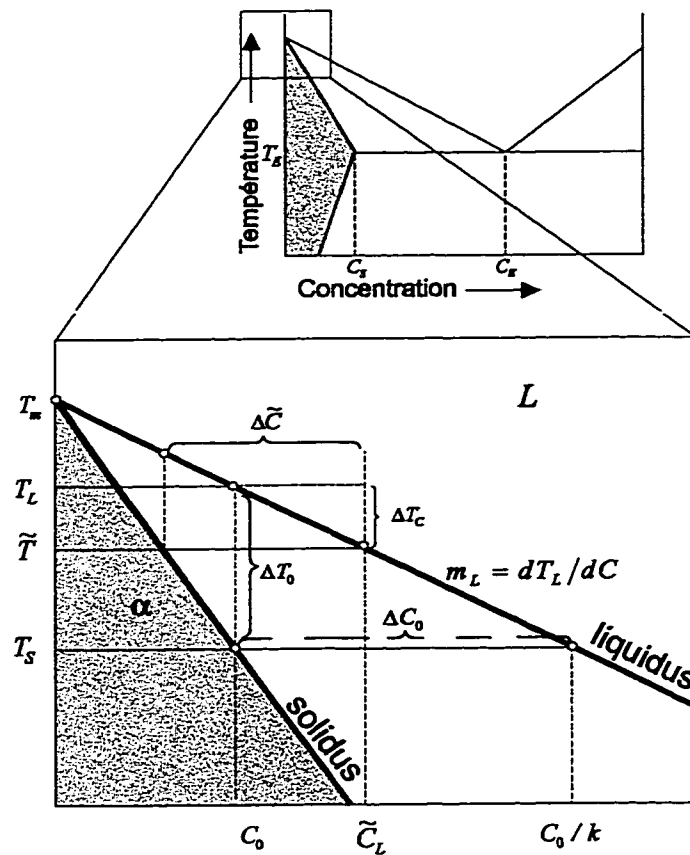


Figure 1.5 (a) Diagramme de phase; (b) Profil de concentration à l'interface'

Afin de simplifier la modélisation, les courbes solidus et liquidus sont considérées comme étant des lignes droites. Dans ce cas, k est constant. Autrement, le coefficient de partition est obtenu par une méthode numérique. Deux autres paramètres, caractérisant un alliage, sont identifiés sur la figure 1.5.

Premièrement, il y a l'intervalle de solidification pour un alliage de composition C_o :

$$\Delta T_o = -m_L \Delta C_o = (T_L - T_S) \quad (4.)$$

et la différence de concentration entre la teneur en soluté de la phase liquide et solide à la température du solidus de l'alliage:

$$\Delta C_o = \frac{C_o(1-k)}{k} \quad (5.)$$

Lorsque l'alliage de composition C_o commence à se solidifier, le premier cristal de solide se forme à T_L et sa composition est kC_o . On peut remarquer, d'après les figures 1.5 et 1.6, que la teneur en soluté du premier germe est plus faible que celle de la composition initiale du liquide. L'excédent en soluté est rejeté en avant du front de solidification (i.e. à l'interface solide/liquide) et diffuse dans le liquide. Durant les refroidissements subséquents, les phases liquide et solide deviennent plus riches en soluté. Étant donné la diffusion complète dans les deux phases, tout le solide devient de composition uniforme $C_s = C_o$ et tout le liquide de composition uniforme $C_L = \tilde{C}_L$. À la température \tilde{T} , le bilan général de conservation de la matière (soluté) devient:

$$C_s f_s + C_L f_L = C_o \quad (6.)$$

où f_s et f_L sont les fractions massiques de la phase solide et liquide. L'équation décrivant la fraction solide est obtenue à partir du diagramme d'équilibre sachant que

$$f_s + f_L = 1 \quad (7.)$$

Ce modèle correspond à la *règle du levier*.

$$f_s = \frac{1}{(1-k)} \cdot \left[\frac{T_L - T}{T_m - T} \right] = \frac{1}{(1-k)} \cdot \left[1 - \frac{C_o}{C_L} \right] \quad (8.)$$

En résumé, durant la solidification à l'équilibre, la composition est homogène avant et après la solidification. Notons que si l'on néglige la zone de liquide près des extrémités des dendrites, la majorité du liquide interdendritique peut être considérée comme étant localement de composition uniforme.

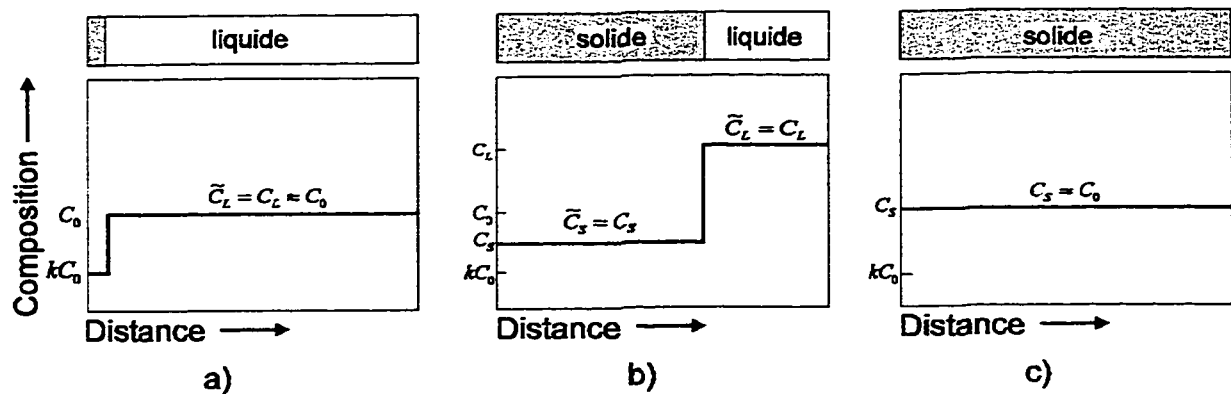


Figure 1.6 Redistribution du soluté pendant la solidification à l'équilibre (a) au début de la solidification; (b) à la température \tilde{T} ; (c) après la solidification'

1.2.2 Solidification sans diffusion dans la phase solide (modèle de Scheil)

Un cas ayant beaucoup plus d'intérêt pratique se présente lorsque la diffusion dans la phase solide est négligeable. Comme dans le cas de la solidification à l'équilibre, le premier cristal à se former est de composition kC_0 à la température du liquidus T_L et l'équilibre à l'interface est toujours maintenue. Durant les refroidissements subséquents, le liquide devient plus riche en soluté et par conséquent les cristaux de solide suivants également. Puisqu'il n'y a pas de diffusion à l'état solide, la composition de ces cristaux demeure inchangée pendant la solidification. Tel que montré à la figure 1.7, à la température \tilde{T} , le solide de composition \tilde{C}_S se forme à partir du liquide de composition \tilde{C}_L et la composition en soluté est non homogène.

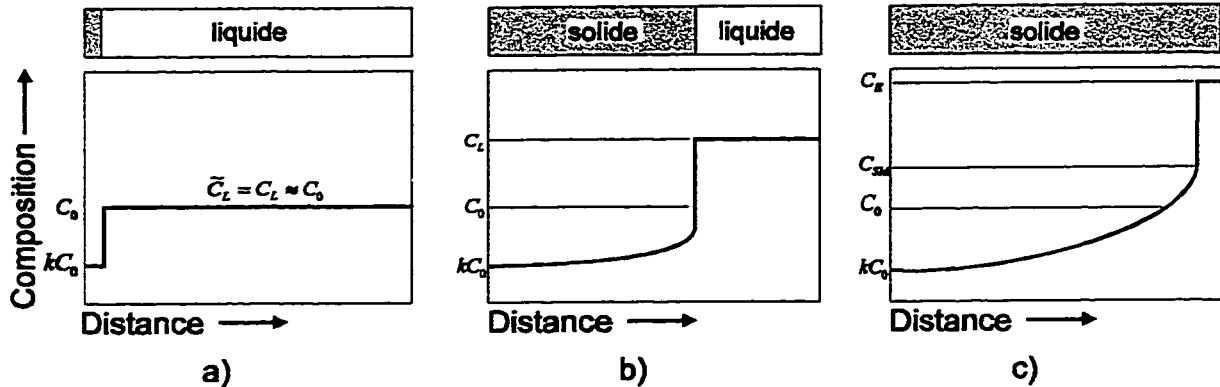


Figure 1.7 Redistribition du soluté pendant la solidification (sans diffusion dans la phase solide). (a) Au début de la solidification; (b) à la température \tilde{T} ; (c) après la solidification¹.

Un simple bilan permet d'obtenir la relation entre la fraction de solide et la composition en égalant le rejet du soluté lorsqu'une petite quantité de solide se forme et l'augmentation résultante en soluté dans la zone liquide.

$$(C_L - \tilde{C}_s)df_s = (1 - f_s)dC_L \quad (9.)$$

En substituant le coefficient de partition et en intégrant avec $\tilde{C}_s = kC_o$ à $f_s = 0$, on trouve la composition de la phase solide à l'interface, \tilde{C}_s :

$$\tilde{C}_s = kC_o(1 - f_s)^{(k-1)} \quad (10.)$$

ou en terme de la composition de la phase liquide:

$$C_L = C_o f_L^{(k-1)} \quad (11.)$$

L'équation (12.), appelée l'équation de la *ségrégation normale* ou l'équation de *Scheil* ou encore l'équation de *Gulliver* (1913), décrit la redistribution du soluté pendant la croissance des cristaux. Ainsi, la fraction solide est exprimée en fonction de la température ou en terme de composition:

$$f_s = 1 - \left[\frac{T_m - T}{T_m - T_L} \right]^{\frac{1}{k-1}} = 1 - \left[\frac{C_0}{C_L} \right]^{\frac{1}{1-k}} \quad (12.)$$

1.2.3 Solidification avec diffusion limitée ou incomplète dans la phase solide (modèle de diffusion inverse)

Drouzy et Mascré⁷ (1961), ainsi que Brody et Flemings⁸ (1966), ont introduit la rétrodiffusion dans la phase solide. Lorsque la diffusion dans la phase solide est importante, ce modèle ne conserve plus la masse. Par conséquent, son application est limitée aux cas où la diffusion est lente. Selon ces auteurs, l'équation modifiée de Scheil devient:

$$\tilde{C}_s = kC_0 \left[1 - (1 - 2ak)f_s \right]^{(k-1)/(1-2ak)} \quad (13.)$$

ou en fonction de la température:

$$f_s = \frac{1}{(1-2ak)} \left(1 - \left[\frac{T_m - T}{T_m - T_L} \right]^{(1-2ak)/(k-1)} \right) \quad (14.)$$

où, $a = \frac{D_s t_f}{l^2}$. a est le nombre adimensionnel de Fourier décrivant la diffusion du soluté dans la phase solide, D_s le coefficient de diffusion dans la phase solide, t_f est le temps de solidification local et l une longueur caractéristique du système. Généralement, l est égal à l'espacement entre les bras primaires, λ_1 , ou secondaires, λ_2 .

Clyde et Kurz⁹ (1981) ont modifié le nombre adimensionnel de l'équation de Brody et Flemings pour se ramener au cas de Scheil lorsque la diffusion dans le solide est négligeable et à la règle du levier lorsque la diffusion est complète dans la phase solide ($D_s \rightarrow \infty$). Il est à noter que cette relation n'a aucun fondement physique. Ce nouveau nombre adimensionnel prend la forme suivante:

$$\xi = a \left[1 - \exp\left(-\frac{1}{a}\right) \right] - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{1}{2a}\right) \quad (15.)$$

Plus récemment, Nastac et Stefanescu¹⁰ (1993) ont introduit un modèle analytique complet pour décrire la micro-ségrégation. Leur modèle prend en compte la redistribution du soluté dans les phases liquide et solide tout en assurant la conservation de masse. La solution analytique exacte est donnée par

$$C_s = kC_0 \left[1 - \frac{(1-k)f_s}{1 - (m+1)[kI_{s,m+1} + I_{L,m+1}]} \right]^{-1} \quad (16.)$$

Avec

$m = 0$	structure planaire
$m = 1$	structure colonnaire
$m = 2$	structure équiaxe

et

$$I_{s,3} = \frac{2f_s}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp \left[- \left(\frac{n\pi}{f_s^{1/3}} \right)^2 \frac{D_s t_f}{R_{max}^2} \right], \quad (17.)$$

$$I_{L,3} = 2f_s^{2/3} (1 - f_s^{1/3}) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_n^2} \exp \left[- \left(\frac{\omega_n}{1 - f_s^{1/3}} \right)^2 \frac{D_L t_f}{R_{max}^2} \right] \quad (18.)$$

où ω_n est donné par l'équation $\omega_n / \tan(\omega_n) = 1 - f_s^{1/3}$. Dans ce modèle, lorsque $D_s, D_L \rightarrow \infty$ l'équation (16.) devient l'équation pour la solidification à l'équilibre.

Finalement, les modèles de micro-ségrégation présentés donnent une relation non linéaire entre la fraction volumique de solide et la concentration (ou la température). Le tableau 1.1 montre les principales hypothèses pour les modèles de micro-ségrégation. Ces modèles supposent une phase liquide

statique. Dans les cas où la vitesse du fluide est non nulle, le transport du soluté s'effectue à l'échelle macroscopique (i.e. macro-ségrégation). Par conséquent, la solidification dépend de l'historique du champ de température du front d'écoulement et seule la règle du levier peut être utilisée correspondant à l'équilibre entre les phases.

Tableau 1.1 Hypothèses utilisées dans les modèles analytiques de micro-ségrégation

Modèle	Diffusion solide	Diffusion liquide	Conservation de la masse du soluté
Levier	complète	complète	oui
Scheil	non	complète	oui
Drouzy et Mascre			non
Brody/Flemings	incomplète	complète	
Clyne/Kurz	paramètre d'ajustement	complète	non
Nastac/Stefanescu	limitée	limitée	oui

1.2.4 Limites des modèles macroscopiques

Les modèles macroscopiques sont très utiles pour déterminer la relation entre la fraction solide et la température (ou les concentrations) mais donnent très peu de renseignement concernant la microstructure. Cependant il est possible de trouver expérimentalement une correspondance entre les temps de refroidissement macroscopique et la taille des grains. Ce type de relation ne donne aucune information reliée à la cinétique de transformation et ne prédit pas les phénomènes associés à la surfusion sur la courbe de refroidissement d'où la nécessité de considéré l'aspect transitoire de l'évolution microstructurale à travers les modèles de germination-croissance.

1.3 Cinétique de transformation des structures équiaxes

Pour prédire correctement la formation microstructurale dans les procédés de fabrication, il faut tenir compte des mécanismes de base de germination et de croissance à l'échelle microscopique en plus des équations de conservation macroscopique.

Les concepts de base de la modélisation équiaxe, incluant la germination et la croissance ont été introduits en 1966 par Oldfield¹¹. Plus récemment, ces travaux ont été appliqués aux fontes grises, aux fontes blanches, aux fontes à graphites sphéroïdales et aux alliages de type dendritique. Durant les années 70, seulement quelques efforts sporadiques ont fait l'objet de ce champ d'étude^{12,13}. Ces travaux étaient basés sur des modèles purement empiriques reliant la microstructure et les conditions du procédé. Depuis la fin des années 80 jusqu'à ce jour, de nombreux travaux de recherche menés principalement par un groupe de chercheurs suisses constitué entre autre de Rappaz, Thévoz et Zou ainsi que des américains tels Nastac, Stefanescu et Goettesch ont rendu accessible la modélisation microstructurale.

Les méthodologies pour modéliser la cinétique de transformation de phase sont classées en deux catégories: l'approche déterministique et probabilistique (également appelée stochastique)^{15,16}. L'approche déterministique tient compte de la germination et de la croissance lorsque les équations d'échange de chaleur et de conservation sont résolues. Les modèles basés sur cette approche sont généralement appelés micro/macro modèles et permettent d'obtenir de l'information relative à la taille des grains et de l'espacement interdendritique. Plus encore, ces modèles fournissent une prédiction très réaliste des courbes de refroidissement tenant compte de la surfusion.

L'approche stochastique est basée sur la probabilité de germination pour fixée la position des nouveaux grains et sur la probabilité de croissance déterminée par les directions cristallographiques préférentielles. Deux techniques sont présentement utilisées pour la modélisation stochastique: la technique *Monte-*

Carlo (MC), basée sur la minimisation de l'énergie de l'interface d'un assemblage de grains et la technique *Cellular Automaton* (CA), introduite par Hesselbarth et Göbel et récemment appliquée par Rappaz *et al.* Cette technique, dite mixte, est basée sur des relations probabilistiques et elle consiste à fixer des sites de germination et des orientations cristallographiques aléatoires à l'intérieur de l'espace de calcul.

Contrairement à l'approche déterministique, l'approche probabilistique, permet de visualiser la microstructure et de considérer les directions préférentielles de la croissance de la dendrite ainsi que des considérations à l'échelle atomique. Ces modèles sont très limités pour traiter la solidification des pièces complexes ou lorsque les grains sont relativement fins comme dans les procédés de moulage classiques. Par contre, dans les cas où les grains sont visibles à l'échelle macroscopique, comme par exemple, lors de la solidification des super-alliages de Nickel des aubes de turbine, cette approche s'avère utile pour visualiser les grains.

Les chapitres suivants traiteront uniquement de l'approche déterministique compte tenu des problèmes de forme et du domaine d'application qui nous intéresse.

La modélisation macroscopique de la solidification utilise une relation simple et unique reliant la température et la fraction de la phase solide, $f_s(T)$. Dans le cas de la micro/macro-modélisation, la fraction solide dépend de la température et de la vitesse du front de solidification pour une structure colonnaire, $f_s(T, v_c)$ et de différents paramètres de solidification pour la structure équiaxe, $f_s(T, n, \dot{T}, \dots)$. En particulier, dans les microstructures équiaxes, la vitesse de croissance des grains n'est pas fonction de la vitesse des isothermes comme dans le cas des structures colonnaires mais de la surfusion locale.

Pour la solidification équiaxe, la solidification débute par l'étape de la germination dans la phase liquide en surfusion (voir figure 1.8). Puis, lorsque les premiers cristaux de solide apparaissent, l'étape de la croissance des grains

commence. Cette croissance est contrôlée par la température, par la diffusion du soluté et par des effets de surface. Finalement, lorsque la fraction solide, f_s , atteint un certain niveau, il y a interaction entre les grains. L'objectif de la modélisation microscopique est de combiner la germination, la croissance et l'empiétement des grains pour obtenir une description complète de la solidification équiaxe.

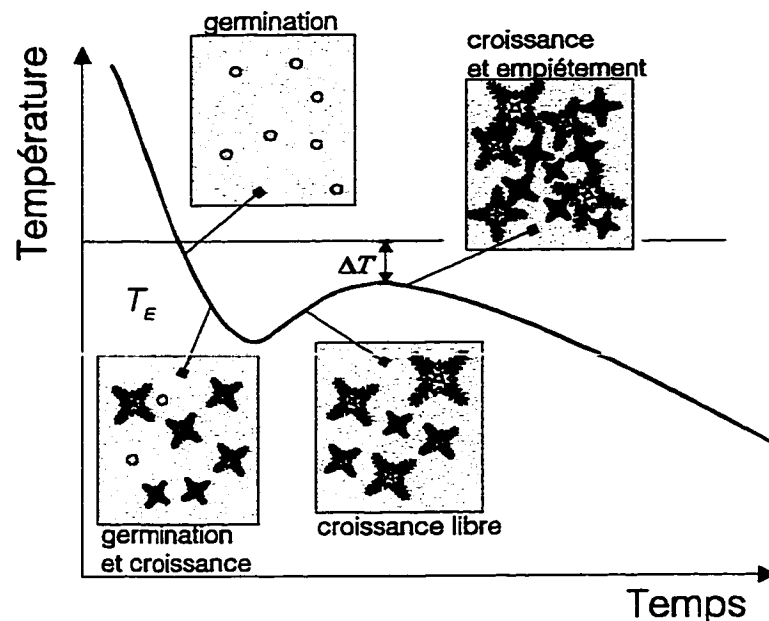


Figure 1.8 Courbe de refroidissement d'un alliage de type dendritique équiaxe et diagramme des différentes étapes de solidification¹⁷

Pour la croissance équiaxe, la fraction solide est généralement exprimée sous la forme suivante:

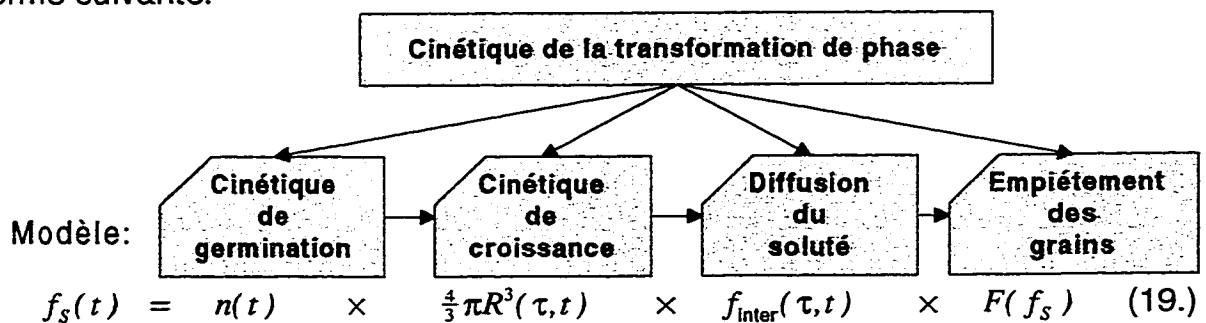


Figure 1.9 Organigramme des modèles pour calculer la fraction solide

où $n(t)$ est la densité de grains au temps t , $R(\tau, t)$ est le rayon moyen de l'enveloppe sphérique du grain observé au temps t et formé au temps τ , $f_{\text{inter}}(\tau, t)$ est la fraction solide volumique interne du grain, et $F(f_s)$ est un facteur tenant compte de l'empiétement des grains. Contrairement aux structures dendritiques, notons que les enveloppes de grain eutectique, étant complètement solides, ont une fraction solide interne, $f_{\text{inter}}(t)$ égale à l'unité.

1.3.1 Cinétique de germination

Le calcul de la densité de grains, $n(\tau)$, (nombre de grains par unité de volume) est assuré par le biais des lois de la cinétique de germination. L'évaluation de la densité de grains est basée sur la théorie des sites de germination hétérogène développée initialement par Turnbull et Fisher^{18,19}. La germination hétérogène suppose que les germes de solide apparaissent spontanément dans le liquide à l'aide d'un substrat étranger comme les parois du moule ou des particules en suspension comme les inoculants. Par hétérogène, on veut dire qu'il existe un état intermédiaire pour lequel le volume considéré peut être divisé en régions non transformées. Dans ce cas, la transformation commence à partir de germes bien identifiables dans la phase liquide. Ce processus s'appelle germination. Les travaux de Turnbull et Fisher portaient sur des modèles faisant intervenir une relation empirique entre le taux de refroidissement, \dot{T} , et la densité finale de grains. La tendance des dix dernières années est d'utiliser la surfusion, ΔT , plutôt que le taux de refroidissement pour décrire la cinétique de germination étant donné que la relation entre ce paramètre et la densité de grains est plus facile à obtenir expérimentalement. De plus, le nombre de grains présents par unité de volume en tout temps, est proportionnel à la surfusion.

Le taux de formation ou de germination des nouveaux grains dans le liquide, $\dot{n}(\tau)$, est obtenu soit en considérant des mécanismes de germination instantanée ou des mécanismes de germination continue.

Les mécanismes de germination continue supposent une dépendance de la densité sur la température dans le temps (figure 1.10). Les relations mathématiques sont obtenues en reliant le taux de germination à la surfusion, au taux de refroidissement ou à la température. Par la suite, une procédure de sommation détermine le nombre de grains final germés. Les mécanismes de germination instantanée supposent un point de saturation des sites. C'est-à-dire, tous les germes se forment à la température de germination, T_N (figure 1.11). De la même façon, une relation empirique doit être obtenue pour relier le nombre de grains final dans un élément de volume au taux de refroidissement ou à la surfusion. Chacun des modèles décrits ci-dessous fait intervenir deux ou trois paramètres déterminés expérimentalement.

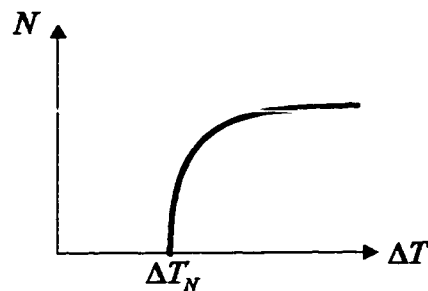


Figure 1.10 Représentation des mécanismes de germination continue

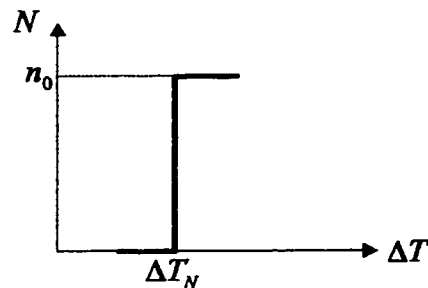


Figure 1.11 Représentation des mécanismes de germination instantanée

Oldfield¹¹ a été un des premiers chercheurs à proposer un modèle continu pour prédire la densité finale de grains. Ce modèle, sous la forme d'une loi de

puissance, a été construit à partir de données expérimentales provenant de fontes. Sous sa forme simple, le modèle d'Oldfield s'exprime selon l'équation suivante:

$$n(t) = K_1 (\Delta T)^b \quad (20.)$$

Et sous sa forme dérivée, le taux de germination s'exprime selon:

$$\dot{n}(t) = \frac{\partial n}{\partial t} = b K_1 (\Delta T)^{b-1} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (21.)$$

Plusieurs auteurs ont étudié expérimentalement la germination. Généralement, le taux de germination hétérogène en fonction de la surfusion s'exprime selon l'équation de Turnbull¹⁹:

$$\dot{n}(t) = K_1 \exp\left(\frac{-K_2}{T(\Delta T)^2}\right) \quad (22.)$$

Cette équation, étant basée sur des mécanismes de minimisation de l'énergie de surface et non pas uniquement à partir de données expérimentaux, exprime plus concrètement la cinétique de germination. La densité de grains, $n(t)$, peut être prédite à chaque pas temps en intégrant le taux de germination selon le temps ou la température:

$$n(t) = \int_{t_0}^t \dot{n}(\tau) d\tau = \int_0^{\Delta T(t)} \dot{n}(T) \cdot \frac{dT}{dT/dt} \quad (23.)$$

En principe, la germination ne s'arrête pas tant que le liquide est en surfusion. Cependant, il ne peut y avoir plus de germes que de sites à la disposition. C'est pourquoi, Hunt²⁰ proposa un modèle tenant compte de la densité initiale des sites de germination, n_0 . Ces sites, étant fonction de la teneur en inoculant, s'atténue lorsque la germination se produit. Le taux de germination, pour une surfusion donnée, s'exprime selon

$$\dot{n}(t) = K_1(n_0 - n(t))\exp\left(\frac{-K_2}{T(\Delta T)^2}\right) \quad (24.)$$

où K_1 , K_2 et n_0 sont déterminées expérimentalement. En se basant sur les travaux de Hunt; Kanetkar et Stefanescu²¹ ont proposé également un modèle de germination instantané où tous les germes se forment à la température de germination T_N :

$$\dot{n}(t) = \mu_1(n_0 - n(t))\exp\left(\frac{-\mu_2}{(\Delta T)^2}\right) \quad (25.)$$

Dans cette formulation, les auteurs ont posé la constante K_1 égale à $\mu_1 = 10^{19} s^{-1}$ et $K_2/T = \mu_2$. Cette approche a ses faiblesses pour déterminer correctement la densité de grains en partie à cause de l'intervalle de température où se produit la germination. Pour une surfusion, ΔT , plus petite qu'une valeur critique $\Delta T_N = \sqrt{K_2}$, il n'y a pas de germination significative. Lorsque ΔT_N est atteint, $n(t)$ augmente très rapidement pour atteindre la valeur de saturation n_0 . Dans les procédés de solidification conventionnelle, l'intervalle de température est de l'ordre de 1 à 10 °C ce qui est bien au-delà de la germination instantanée. De plus, les constantes sont difficiles à déterminer expérimentalement. Cette approche pourrait être utilisée pour les cas de solidification eutectique où l'intervalle de germination est très limitée. Par exemple, pour une fonte eutectique, Kanetkar et Stefanescu ont trouvé un intervalle d'environ 0.1°C. Ainsi, une température de germination ΔT_N , où tous les grains eutectiques germent en même temps, peut être choisie. Cette méthode, si applicable, permet une économie au niveau du temps de calcul. Ces auteurs ont proposé de remplacer la formulation complexe de l'équation (25.) par une fonction Dirac:

$$\frac{dn}{dT} = n_0 \cdot \delta_D(T - T_N) = n_0 \cdot \delta(\Delta T - \sqrt{K_3}) \quad (26.)$$

Si plus d'un type de sites de germe est présent, il est possible d'introduire une série de fonctions Dirac:

$$\frac{dn}{dT} = \sum_i n_{0,i} \delta_D(T - T_{N,i}) \quad (27.)$$

Maxwell et Hellawell¹³ ont également proposé un modèle similaire pour traiter les alliages ayant une solidification péritectique comme par exemple les alliages Al-Ti ou Pb-Bi:

$$\dot{n}(t) = (n_0 - n(t)) \mu_1 \exp \left[\frac{\text{fonct}(\theta)}{(\Delta T)^2 (T_p - \Delta T)} \right] \quad (28.)$$

T_p étant la température de transformation péritectique et $\text{fonct}(\theta)$ est une fonction de l'angle de contact. Les paramètres déterminés expérimentalement sont n_0 , μ_1 et θ .

D'autres modèles de germination continue, basés sur des fonctions statistiques, ont été introduits pour décrire la germination lorsque la distribution de la densité est étendue. Premièrement, Goettsch et Dantzig²² ont appliqué une distribution quadratique reliée au rayon des grains pour décrire la densité, donnée par $n(r) = a_0 + a_1 r + a_2 r^2$. La densité de grain, $n(r)$, peut être également exprimée en fonction du nombre de sites initiaux, n_0 ; de la taille maximale des grains, R_{\max} et de la taille minimale des grains, R_{\min} :

$$n(r) = -\frac{3n_0}{(R_{\max} - R_{\min})^3} (R_{\max} - r)^2 \quad (29.)$$

Deuxièmement, Thévoz *et al.*^{23,24}, ont introduit un modèle faisant intervenir une distribution Gaussienne du nombre de germes formés versus la surfusion:

$$\frac{\partial n}{\partial(\Delta T)} = \frac{n_0}{\sqrt{2\pi\Delta T_\sigma}} \cdot \exp \left[-\frac{(\Delta T - \Delta T_N)^2}{2(\Delta T_\sigma^2)} \right] \quad (30.)$$

Dans cette équation, les paramètres déterminés expérimentalement sont: la densité totale de sites, n_0 ; la surfusion moyenne, ΔT_N et l'écart type de la distribution, ΔT_σ . Ces paramètres ont été obtenus expérimentalement pour les alliages aluminium-silicium²⁵ et pour les fontes grises²⁶ et sont applicables autant pour les structures dendritiques que pour les structures eutectiques équiaxes. Le tableau 1.2 présente un sommaire des différents modèles de germination.

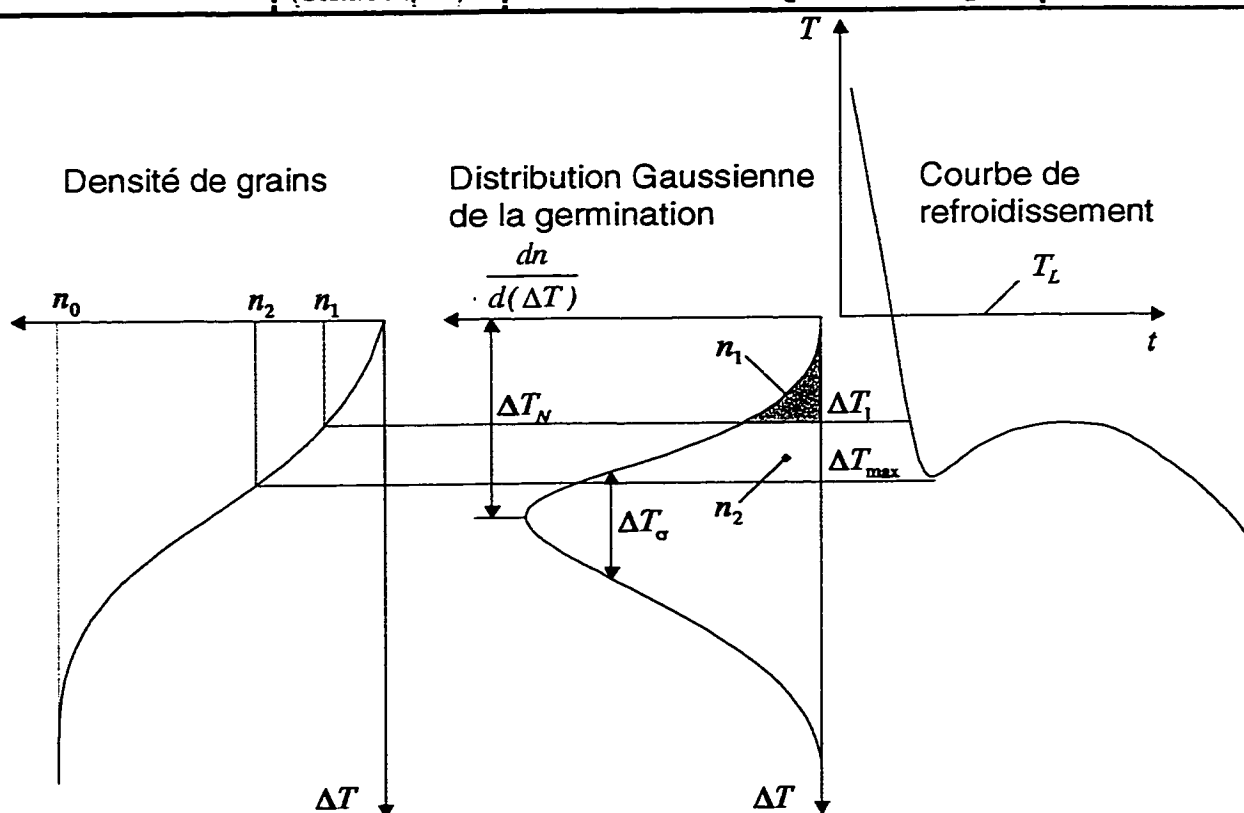
La plupart des modèles décrits précédemment utilisent les principes de la germination hétérogène avec un facteur d'atténuation pour arrêter la germination. Lorsque la surfusion est faible, l'intervalle de germination (où la densité de grains part de zéro jusqu'à une valeur maximale n_0) est tellement faible dans le temps qu'il est difficile de reproduire les observations expérimentales. De plus, différents inoculants peuvent devenir actifs à différents niveaux de surfusion. C'est pourquoi, Thévoz *et al.* ont développé un modèle basé sur une distribution Gaussienne de sites de germination en fonction de la surfusion.

La figure 1.12 résume le modèle développé par ces auteurs. Pour une surfusion ΔT_1 , la densité de grains n_1 est donnée par l'intégrale de la distribution de sites de germination allant de zéro jusqu'à ΔT_1 .

Ainsi, la densité de grains est mise à jour à chaque pas temps en fonction de la surfusion. Lorsque le minimum de la courbe de refroidissement est atteint, ceci correspond à la densité finale n_2 associée à la surfusion maximale ΔT_{\max} .

Tableau 1.2 Sommaire des modèles de germination

Modèle	Type de germination	Équation	Paramètres d'ajustement
Oldfield ¹¹	continu	$n(t) = K_1 (\Delta T)^b$	K_1, b
Maxwell et Hellawell ¹³	continu	$\dot{n}(t) = (n_0 - n(t)) \mu_1 \exp \left[\frac{\text{fonct}(\theta)}{(\Delta T)^2 (T_p - \Delta T)} \right]$	n_0, θ
Turnbull ¹⁹ et Hunt ²⁰	instantané	$\dot{n}(t) = K_1 \exp \left(\frac{-K_2}{T(\Delta T)^2} \right)$	K_1, K_2
Kanetkar et Stefanescu ²¹	instantané	$\dot{n}(t) = \mu_1 (n_0 - n(t)) \exp \left(\frac{-\mu_2}{(\Delta T)^2} \right)$	μ_1, μ_2, n_0
Goettsch et Dantzig ²²	continu (statistique)	$n(r) = -\frac{3n_0}{(R_{\max} - R_{\min})^3} (R_{\max} - r)^2$	n_0, R_{\max}, R_{\min}
Thévoz et al. ^{23,24}	continu (statistique)	$\frac{\partial n}{\partial (\Delta T)} = \frac{n_0}{\sqrt{2\pi}\Delta T_\sigma} \cdot \exp \left[-\frac{(\Delta T - \Delta T_N)^2}{2(\Delta T_\sigma^2)} \right]$	$n_0, \Delta T_N, \Delta T_\sigma$

Figure 1.12 Détermination de la densité de grains selon le modèle de Thévoz et al.^{ps}

1.3.2 Cinétique de croissance

L'objectif des modèles de croissance est de calculer le rayon moyen des grains, $R(t)$, en fonction du temps. L'évolution du rayon des grains est également fonction de la surfusion pour la croissance des grains eutectiques comme pour la croissance des grains de morphologie dendritique. Dans cette section, une revue sommaire décrivant les modèles de formation microstructurale est donnée tout en mettant l'emphasis sur les alliages binaires. Les forces motrices pour la croissance de la pointe de la dendrite sont la diffusion thermique, la diffusion du soluté ainsi que des effets de capillarité et de cinétique à haute vitesse. Selon le type de structure dendritique en présence, la prédominance des forces est différente. Ainsi, on distingue:

- la structure équiaxe pour les métaux purs gouvernée par la diffusion thermique;
- la structure équiaxe pour les alliages gouvernée par la diffusion thermique et la diffusion du soluté;
- la structure colonnaire gouvernée par la diffusion du soluté.

La surfusion à la pointe de la dendrite est donnée par la contribution des surfusions thermiques, ΔT_{th} , du soluté, ΔT_c , de courbure, ΔT_r , et de cinétique, ΔT_k . Étant donné les vitesses de croissance faibles en moulage, les termes de cinétique sont négligés.

L'expression de la vitesse de croissance des grains, v_g peut être exprimée suivant:

$$v_g = \frac{\partial R}{\partial t} = \mu_3 \Delta T^2 \quad (31.)$$

où μ_3 est un coefficient fonction des caractéristiques de l'alliage et de sa structure de solidification. Lorsque cette équation est utilisée, on suppose une surfusion à l'interface égale à la surfusion dans le liquide. Cette hypothèse implique que la force motrice de la solidification eutectique est strictement la redistribution du soluté. La surfusion thermique est négligée pendant la solidification. Cette approximation est tout à fait raisonnable considérant qu'elle est de l'ordre de 10^{-3}°C .

Croissance eutectique équiaxe:

La morphologie des grains eutectiques se présente sous deux formes. Les figures 1.13a) et 1.13b) illustrent une structure de grain eutectique appelée respectivement structure eutectique coopérative lamellaire et divorcée. La structure eutectique coopérative est présente dans les fontes eutectiques en général et les alliages Al-Si. Tandis que la structure eutectique divorcée est typique des fontes à graphite sphéroïdale (phase austénitique γ). Dans les deux cas, les microstructures impliquent la croissance couplée de deux phases solides.

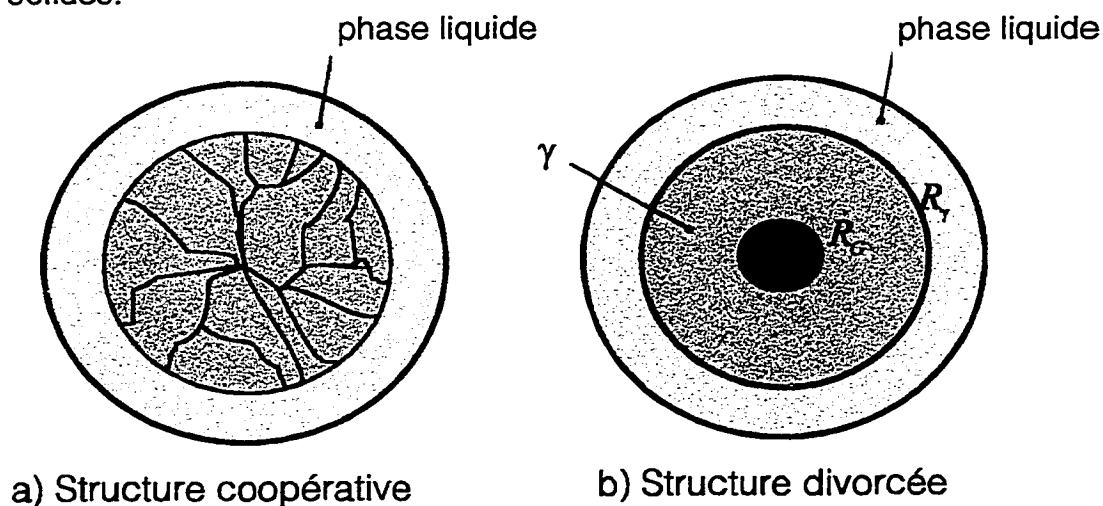


Figure 1.13 Structures de grains eutectiques équiaxes

Pour les structures de grains coopératives, en considérant la distribution du soluté entre les lamelles et l'équilibre des forces de surfaces à la rencontre des trois phases (2 solides et une liquide), les travaux de Jackson et de Hunt²⁷ ont permis de calculer la surfusion ΔT_E du front eutectique, l'espacement entre les lamelles et la vitesse de croissance v_g . Ainsi, ils ont obtenu les relations suivantes:

$$\lambda_E v_g = \frac{K_r}{K_c} \quad (32.)$$

et

$$\Delta T_E^{-2} v_g = \frac{1}{4K_c K_r} \quad (33.)$$

Les constantes K_c et K_r sont calculées à partir des propriétés de l'alliage et aussi à partir d'un bilan de diffusion du soluté pour K_c et de calculs de capillarité pour K_r . Beaucoup d'alliages eutectiques comme les alliages de type Fe-C et Al-Si ont des morphologies eutectiques irrégulières où les phases sont non parallèles avec des espacements irréguliers, λ_E (figure 1.13a). Basée sur des observations expérimentales faites sur des alliages Fe-C, Jones et Kurz²⁸ proposa une valeur d'espacement lamellaire $\langle \lambda_E \rangle$ donnée par:

$$\langle \lambda_E \rangle = \phi \lambda_E \quad \text{ou} \quad \langle \lambda_E \rangle^2 v_g = \phi^2 \frac{K_r}{K_c} \quad (34.)$$

où ϕ est une constante caractérisant l'espace entre les lamelles. L'équation entre la surfusion et le taux de croissance devient alors

$$v_g = \left(\frac{\phi}{\phi^2 + 1} \right)^2 \frac{1}{K_c K_r} \Delta T_E^2 \quad (35.)$$

d'où,

$$\mu_3 = \left(\frac{\phi}{\phi^2 + 1} \right)^2 \frac{1}{K_c K_r} \quad (36.)$$

Les coefficients de croissance, μ_3 , pour les structures eutectiques sont données au tableau 1.3

Tableau 1.3 Coefficients de croissance pour les grains eutectiques équiaxes

Structure équiaxe	Coefficients de croissance	Référence
Eutectique coopérative	• Fonte grise:	
	$7.25 \times 10^{-8} - 9.5 \times 10^{-8} \text{ m/s} \cdot ^\circ\text{C}^2$	(29)
	$1.20 \times 10^{-8} - 3.1 \times 10^{-8} \text{ m/s} \cdot ^\circ\text{C}^2$	(30)
	$7.25 \times 10^{-8} \text{ m/s} \cdot ^\circ\text{C}^2$	(3)
	• Alliage Al-Si:	
	$1 \times 10^{-6} - 1 \times 10^{-7} \text{ m/s} \cdot ^\circ\text{C}^2$	(31)
	$1.2 \times 10^{-5} \text{ m/s} \cdot ^\circ\text{C}^2$	(32)
Eutectique divorcée	• Fonte à graphite sphéroïdale (ou nodulaire):	
	$2.5 - 34.5 \times 10^{-8} \text{ m/s} \cdot ^\circ\text{C}^2$	(11)
	$3.87 \times 10^{-8} \text{ m/s} \cdot ^\circ\text{C}^2$	(3)

Pour les structures de grains divorcées, en supposant l'équilibre aux interfaces, l'expression pour la cinétique de croissance des sphères de graphite et des coquilles austénitiques est obtenue à partir d'un bilan de masse à chacune des frontières mobiles. Par la suite, en substituant les expressions pour les gradients de concentration de carbone aux interfaces graphite-austénite ($r = R_G$) et austénite-liquide ($r = R_\gamma$), Bradley³³ a montré que la cinétique de croissance du

graphite nodulaire et des coquilles austénitiques s'expriment selon les relations suivantes:

$$\frac{dR_G}{dt} = D_c^\gamma \frac{(C^{\gamma/L} - C^{\gamma/G})}{\left(\frac{\rho_G}{\rho_\gamma} C^{G/\gamma} - C^{\gamma/L}\right)} \cdot \frac{1}{R_G \left(1 - \frac{R_G}{R_\gamma}\right)} \quad (37.)$$

$$\frac{dR_\gamma}{dt} = D_c^\gamma \frac{(C^{\gamma/L} - C^{\gamma/G})}{\left(\frac{\rho_L}{\rho_\gamma} C^{L/\gamma} - C^{\gamma/L}\right)} \cdot \frac{1}{R_\gamma \left(\frac{R_\gamma}{R_G} - 1\right)} \quad (38.)$$

où, D_c^γ est la diffusivité du carbone dans l'austénite, ρ_j la densité de la phase j , $C^{i/j}$ la concentration en carbone à l'interface et R_j le rayon de la composante j (G =Graphite, γ =austénite et L =liquide). Les concentrations, calculées à partir du diagramme d'équilibre, sont exprimées en pourcentage massique.

Finalement, pour les structures de grains divorcées, Watterfall et al. ont trouvé une formulation similaire tenant compte du rayon du grain:

$$v_g = K_c^{-1} \frac{\Delta T_E}{R} \quad (39.)$$

où R est le rayon du grain lui-même et K_c^{-1} est une constante reliant la diffusion du carbone à travers la coquille de la phase austénitique. Basé sur cette approche et en utilisant les données thermodynamiques pour les systèmes Fe-C, Chipman³⁴ a proposé des relations décrivant les concentrations de carbone aux interfaces en terme de la surfusion $\Delta T = T_E - T(t)$. En utilisant $T_E = 1154^\circ\text{C}$, $D_c^\lambda = 10 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ et en posant $\rho_L \approx \rho_\gamma$ et $\rho_\gamma \approx 3.5\rho_G$, il a obtenu les relations suivantes pour décrire la cinétique de croissance en terme de la surfusion:

$$\frac{dR_G}{dt} = 3.21 \times 10^{-10} \Delta T \cdot \frac{1}{R_G \left(1 - \frac{R_G}{R_\gamma}\right)} \quad (40.)$$

$$\frac{dR_\gamma}{dt} = 3.91 \times 10^{-9} \Delta T \cdot \frac{1}{R_\gamma \left(\frac{R_\gamma}{R_G} - 1\right)} \quad (41.)$$

Lesoult³⁵ a présenté un résultat similaire pour décrire la croissance de la coquille austénitique en considérant un rapport $R_\gamma/R_G = 2.4$ durant la solidification eutectique:

$$\frac{dR_\gamma}{dt} = 2.87 \times 10^{-9} \Delta T \cdot \frac{1}{R_\gamma} \quad (42.)$$

Croissance dendritique équiaxe:

La modélisation de la croissance dendritique nécessite une approche théorique beaucoup plus complexe que la croissance eutectique. Ainsi, les modèles doivent prendre en compte la distribution du soluté et la cinétique de l'extrémité de la dendrite. i.e. les modèles de micro-ségrégation. La micro-ségrégation est importante car elle influence directement les propriétés mécaniques.

La morphologie des grains dendritiques équiaxes se présente sous deux formes: la structure dendritique en forme d'étoile et la structure globulaire (voir la figure 1.14). Dans le premier cas, les bras primaires croissent distinctement selon les directions cristallographiques $\langle 100 \rangle$ et la fraction solide occupée par les bras dendritiques est relativement petite par rapport à l'enveloppe du grain. Dans le deuxième cas, la fraction solide est sensiblement dans le même ordre de grandeur que l'enveloppe. Lorsque la surfusion est importante, la structure globulaire est généralement prédominante^{3,36,37}.

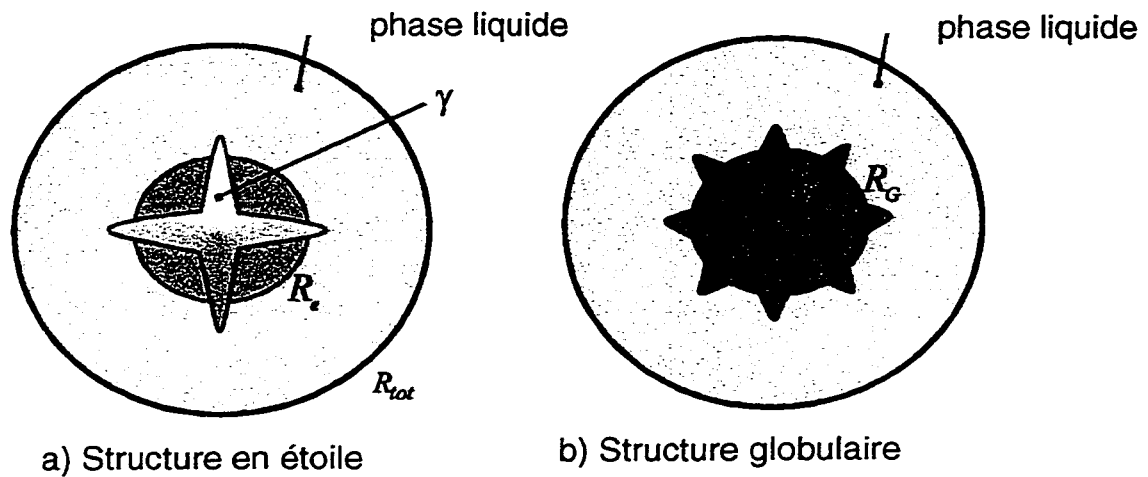


Figure 1.14 Structures de grains dendritiques équiaxes

Rappaz et Thévoz³⁸ ont développé un modèle pour décrire la croissance dendritique pour les morphologies axiales ou en étoile. La distribution est calculée à partir d'une sphère équivalente, de rayon R_s (figure 1.14a), ayant le même volume que la dendrite et en supposant qu'il n'y a pas de diffusion dans la phase solide. Dans ce modèle, on fait également l'hypothèse d'une composition uniforme dans la zone pâteuse.

La vitesse de croissance de la sphère est calculée à partir de la vitesse de croissance de l'extrémité de la dendrite et d'un bilan de masse. Ainsi, en supposant que la surfusion du soluté prédomine sur la surfusion thermique, ces auteurs ont obtenu les relations suivantes:

$$v_g = \mu_4 \Delta T_c^2 \quad (43.)$$

$$\text{Avec, } \mu_4 = \frac{D_L}{[(2\pi^2) \Gamma m_L (k-1) C_0]} \quad (44.)$$

Où, m_L est la pente du liquidus, C_0 la composition initiale du liquide, Γ le coefficient de Gibbs-Thomson et k le coefficient de partition entre les phases.

Une fois que l'extrémité de la dendrite atteint R_{tot} , qui pour certains alliages peut se produire même avec $f_s = 0.1$, un modèle de microségrégation comme l'équation de Scheil peut être utilisé pour calculer f_s pendant la solidification restante. Dans ce modèle, on suppose la croissance d'un seul grain dans un volume sphérique de volume $V = 4/3 \pi R_{tot}^3$, R_{tot} étant le rayon final moyen des grains.

Afin d'éviter l'utilisation de l'équation de Scheil, Nastac et Stefanescu³⁷ ont proposé un modèle utilisant une composition moyenne dans le liquide au lieu d'une composition à $r = R_{tot}$. Dans ce modèle, les germes croissent comme des sphères (figure 1.14b) jusqu'à ce que le rayon de ces dernières devienne supérieur au rayon de l'instabilité minimum. Ensuite, la sphère dégénère en structure dendritique. Mullins et Sekert³⁹ ont trouvé un rayon critique égal à $R_c = 14\Gamma/\Delta T$ pour lequel les grains sphériques changent de forme. La structure globulaire est typique des alliages fortement inoculés.

Contrairement au modèle de Rappaz *et al.*, ce modèle calcul la croissance dendritique comme une fonction de la surfusion thermique, ΔT_{th} , et de la redistribution du soluté, ΔT_c . Selon Stefanescu, la surfusion est donnée par la solution d'Ivantsov:

$$\Delta T = \Delta T_c + \Delta T_{th} = m_L \Omega_c \tilde{C}_L (k - 1) + \frac{\Omega_{th} \Delta H_f}{C_p} \quad (45.)$$

Où, Ω_c est la supersaturation en soluté (ou chimique), Ω_{th} la supersaturation thermique et \tilde{C}_L la composition de l'interface.

Considérant une approximation hémisphérique (ce qui est généralement le cas), les supersaturations peuvent être directement reliées au nombre de Péclet:

$$\Omega_c = Pe_c = \frac{v_g R_d}{2D_L} \quad \text{et} \quad \Omega_{th} = Pe_{th} = \frac{v_g R_d}{2\alpha_L} \quad (46.)$$

Où, R_d est le rayon de l'extrémité de la dendrite, D_L le coefficient de diffusion dans la phase liquide et α_L la diffusivité thermique dans la phase liquide.

La vitesse de croissance et le rayon R_d sont couplés à l'aide du critère de stabilité proposé par Mullins et Sekerka³⁹:

$$R_d = [\Gamma]^{0.5} [\sigma^* (m_L G_c - G_{th})]^{-0.5} \quad (47.)$$

σ^* étant une constante de stabilité de l'ordre de $(2\pi)^{-2}$, G_c le gradient de concentration et G_{th} le gradient thermique.

Les gradients de concentration et de température sont déterminés à partir des flux à l'interface:

$$G_c = \frac{\partial C_L(\tilde{R}_d)}{\partial r} = \frac{v_g \tilde{C}_L (k-1)}{2D_L} \quad \text{et} \quad G_{th} = \frac{\partial T_L(\tilde{R}_d)}{\partial r} = -\frac{v_g \rho L}{2\kappa_L} \quad (48.)$$

Où, \tilde{R}_d est la position de l'interface, ρ la densité et κ_L la conductivité thermique.

Par le biais du nombre de Péclet, ces gradients sont également fonction de la surfusion. Ce qui donne:

$$m_L G_c = Pe_c \tilde{C}_L (k-1) m_L \tilde{R}_d^{-1} = \Delta T_c \tilde{R}_d^{-1} \quad \text{et} \quad G_{th} = -Pe_{th} \Delta H_f (C_p \tilde{R}_d)^{-1} = -\Delta T_{th} \tilde{R}_d^{-1} \quad (49.)$$

En substituant l'équation (49.) dans l'équation (47.), on obtient

$$R_d = \Gamma(\sigma^* \Delta T)^{-1} \quad (50.)$$

Finalement, la vitesse de croissance moyenne est calculée en substituant (46.) et (50.) dans (45.):

$$\bar{v}_g = \mu_5 \Delta T^2 \quad (51.)$$

Avec,

$$\mu_5 = \frac{\sigma^*}{2\Gamma} \left[\frac{\tilde{C}_L (k-1) m_L}{D_L} + \frac{\rho L}{\kappa_L} \right]^{-1} \quad (52.)$$

La surfusion dans le liquide pour un système fermé est obtenue par

$$\Delta T = T_L + m_L (\bar{C}_L - C_0) - \bar{T} \quad (53.)$$

Où, T_L est la température du liquidus, \bar{C}_L la composition moyenne dans le liquide et \bar{T} la température moyenne dans l'élément de volume.

Le tableau 1.4 résume les modèles et leurs coefficients associés pour modéliser la croissance dendritique.

Tableau 1.4 Coefficients de croissance pour les grains dendritiques équiaxes

Structure équiaxe	Coefficients de croissance	Référence
Dendritique globulaire	$\mu_4 = D_L [2\pi^2 \Gamma m_L (k-1) C_0]^{-1}$ avec $v_g = \mu_4 \Delta T_c^2$	(38)
Dendritique en forme d'étoile	$\mu_5 = [2\pi^2 \Gamma m_L (k-1) \tilde{C}_L D_L^{-1} + \rho \Delta H_f \kappa_L^{-1}]^{-1}$, $\mu_6 = 0$ $\mu_5 = 1.488 \times 10^{-6} \text{ m/s} \cdot \text{K}^3$, $\mu_6 = 2.904 \times 10^{-6} \text{ m/s} \cdot \text{K}^2$ avec $v_g = \mu_5 \Delta T^2 + \mu_6 \Delta T^3$ (Alliage Al-7%Si)	(37) (21)

1.3.3 Diffusion du soluté - fraction solide interne du grain

Contrairement à la solidification eutectique où le grain formé est complètement solide, la solidification dendritique équiaxe présente une fraction liquide interdendritique dans l'enveloppe du grain, f_{inter} . Dustin et Kurz⁴⁰ (1986) ont développé une équation reliant la fraction solide associée à la formation de la phase dendritique primaire, f_s par le produit de la fraction de grains, f_g par la fraction interne de solide à l'intérieur du grain, f_{inter} . La fraction solide présente en tout temps est définie par

$$f_s = f_g \cdot f_{inter} \quad (54.)$$

$$\text{Avec } f_g = \left[\frac{R_g}{R_{tot}} \right]^3 \quad (55.)$$

$$\begin{array}{lll} \text{et } f_{inter} = 1 & \Leftrightarrow & \text{pour la solidification eutectique} \\ 0 \leq f_{inter} \leq 1 & \Leftrightarrow & \text{pour la solidification dendritique} \end{array}$$

Pour déterminer f_{inter} , un modèle basé sur la diffusion et la conservation du soluté a été développé pour les alliages binaires par Rappaz et Thévoz³⁸ (1987). En supposant une diffusion complète dans le liquide interdendritique de l'enveloppe du grain, ces chercheurs ont considéré un bilan de soluté à l'échelle du grain équiaxe et un flux de soluté sortant de l'enveloppe. Le modèle analytique consiste à substituer le profil réel de diffusion par une couche limite équivalente, d'épaisseur δ (figure 1.15). Ce modèle permet d'établir la relation entre la fraction volumique interne de la phase solide du grain en fonction de la supersaturation chimique et du nombre de Péclet via les équations suivantes (C_L^* : composition de la phase liquide à l'extrémité de la dendrite et Pe_c le nombre de Péclet du grain):

$$f_{inter}(t) = \Omega_c \cdot g(Z) \quad (56.)$$

où

$$\Omega_c = \frac{C_L^* - C_0}{C_L^*(1-k)} = \frac{\Delta T}{(\Delta T + m_L C_0)(1-k)} \quad (57.)$$

et

$$g(Z) = \left(1 + \frac{3Z}{2} + Z^2 + \frac{Z^3}{4} \right) \quad (58.)$$

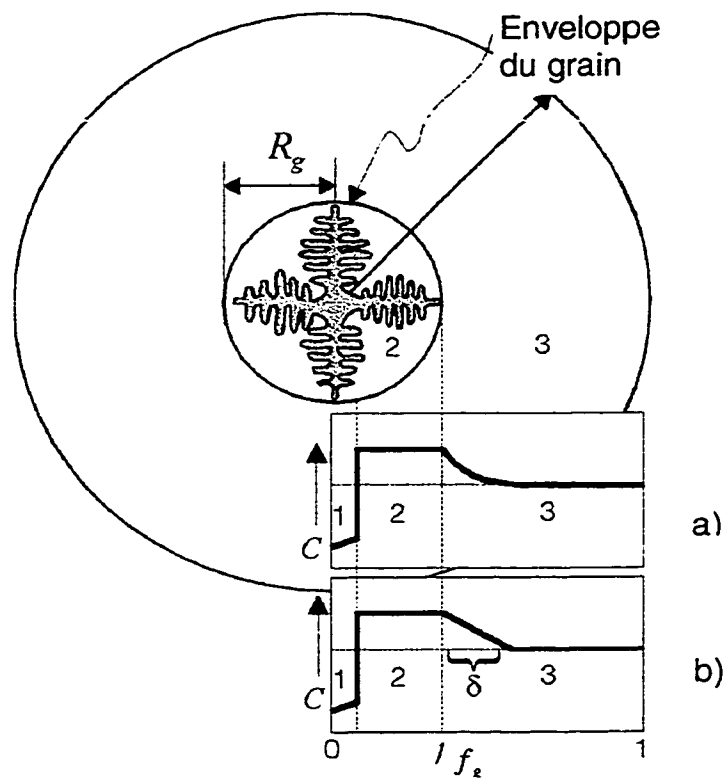


Figure 1.15 Profils de diffusion du soluté selon le profil réel (a) ou calculés analytiquement (b) selon le modèle de Rappaz et Thévoz²¹

$$\text{avec } Z = \frac{\delta}{R_g} = \frac{2D_L}{v_g R_g} = \frac{1}{Pe_c} \quad (59.)$$

$$\text{d'où } \frac{df_{inter}(t)}{dt} \approx \frac{d\Omega_c}{dt} \cdot g(Z) + \frac{dg(Z)}{dt} \cdot \Omega_c \quad (60.)$$

Où, $g(Z)$ est une fonction corrective pour prendre en considération la couche de soluté, δ , autour de l'enveloppe du grain.

En supposant que la variation de $g(Z)$ est très faible dans le temps, la dérivée de la fraction interne de solide s'exprime de la façon suivante:

$$\frac{df_{inter}(t)}{dt} \approx \frac{d\Omega_c}{dt} \cdot g(Z) \approx \frac{g(Z)}{C_0 \cdot (1-k)} \cdot \frac{dC_L^*}{dt} = \frac{g(Z)}{m_L C_0 \cdot (1-k)} \cdot \frac{dT^*}{dt} \quad (61.)$$

1.3.4 Solidification interdendritique et maturation

Après l'étape de la croissance dendritique, commence la solidification du liquide interdendritique. Les branches des dendrites vont croître au fur et à mesure que l'extrémité de la dendrite progresse. Ainsi, l'espacement de départ entre les branches de l'extrémité sera très différent de l'espacement final.

En supposant que l'espacement interdendritique primaire est d'abord influencé par la diffusion thermique, Trivedi⁴¹ a obtenu la relation suivante. Cette relation est basée sur une approche analytique à partir d'un bilan de soluté effectué sur une dendrite isolée.

$$\lambda_1^2 = \frac{\sqrt{2}}{14} \frac{D_L \Gamma}{G_{th} v_g R_{tot}} \quad (62.)$$

Les modèles de maturation des bras dendritiques font tous intervenir la racine cubique de l'espacement interdendritique secondaire, λ_2 , en fonction du temps

de solidification local. Kattamis⁴² (1967) fut un des premiers à prédire la maturation des bras dendritiques. Par la suite, Feurer et Wunderlin⁴³ (1976), de même que Kirkwood⁴⁴ (1985), ont développé un modèle géométrique fréquemment appliqué aux alliages d'aluminium. Ce modèle fait intervenir la variation de la concentration dans le liquide pendant la maturation. L'espacement entre les bras dendritiques secondaires s'exprime selon la relation suivante:

$$(\lambda_2)^3 = M \cdot t_f \quad (63.)$$

$$\text{Avec, } M = \frac{166D_L\Gamma}{m_L(1-k)} \cdot \frac{\ln\left[\frac{C_E}{C_0}\right]}{(C_E - C_0)} \quad (\text{Feurer et Wunderlin}) \quad (64.)$$

$$\text{où, } M = \frac{128D_L\Gamma}{m_L(1-k)} \cdot \frac{\ln\left[\frac{C_E}{C_0}\right]}{(C_E - C_0)} \quad (\text{Kirkwood}) \quad (65.)$$

La taille finale des grains, R_{tot} est donnée par

$$R_{tot} = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (66.)$$

1.3.5 Empiètement des grains

Lors de la solidification des alliages de type dendritique équiaxe, le grain interagit par l'intermédiaire de la couche limite de soluté. Cette interaction est incluse à travers la couche de diffusion, δ , dans le modèle de diffusion de Rappaz. Ainsi, le terme $F(f_s)$ de l'équation (19.) est dans ce cas égal à l'unité. Par contre, pour les grains eutectiques, la couche de soluté est du même ordre

que la taille des grains. La relation entre f_s et R doit tenir compte de l'empiétement des grains lorsque la fraction solide commence à devenir importante.

Vers la fin de la solidification équiaxe, c'est-à-dire lorsque la fraction solide est proche de l'unité, les grains se rencontrent et commencent à interagir avec leurs voisins ce qui diminue l'interface solide/liquide effective. L'empiétement des grains est généralement traité en utilisant le modèle d'Avrami⁴⁵ (ou de Johnson-Mehl⁴⁶). Ce modèle a été développé pour modéliser la recristallisation dans les solides. Contrairement à la recristallisation, dans les problèmes de solidification, la germination et la croissance des grains de la nouvelle phase se produit dans une matrice liquide et non solide. Ce modèle suppose une germination aléatoire dans la matrice, un taux de germination et une vitesse de croissance constants. Cependant, on peut pondérer la surface effective de l'interface par $(1 - f_s)$ car la surface totale des grains est donnée par $n(t) \cdot 4\pi R^2(t)$. D'où,

$$df_s = n \cdot 4\pi R^2(t) \cdot dR(t) \cdot \Psi(f_s) \quad \text{avec} \quad \Psi(f_s) = 1 - f_s \quad (67.)$$

L'équation dérivée devient alors:

$$f_s(t) = 1 - \exp\left[-\frac{4}{3}\pi R^3(t) \cdot n\right] \quad (68.)$$

Le modèle d'Avrami comporte certaines limitations:

- dans les problèmes de solidification le taux de germination et la vitesse de croissance ne sont pas constants car ils dépendent de la surfusion qui varie dans le temps;

- le modèle de base d'Avrami considère des grains solides fixes dans une matrice solide. Durant la solidification équiaxe, les grains solides peuvent se déplacer librement dans la phase liquide;
- pour que la fraction solide tende vers l'unité, il faut que le rayon du grain tende vers l'infini.

Pour pallier à ces limitations, dans sa thèse, Zou²² a développé un modèle analytique d'empilement pour deux cas limites: l'arrangement compact CFC et l'empilement cubique simple des grains. On suppose ici que les grains sphériques occupent les sites d'un arrangement géométrique défini. Ceci s'explique par le fait que les grains équiaxes formés dans la phase liquide peuvent se déplacer librement et former un arrangement régulier. Notons que l'empilement des grains ne débute que lorsque la germination est terminée. Donc, dans ce travail on supposera que la densité de grains, n , reste constante lors de l'interaction entre les grains.

Contrairement au modèle d'Avrami, dans ce modèle, la fraction solide devient unitaire pour des grains de dimensions finis. Le rayon critique moyen, R_{crit} , et la fraction solide associée, $f_{s,crit}$ (facteur de compacité), pour que les grains se touchent est calculée géométriquement par le volume occupé des sphères selon l'arrangement de grains choisi. Lorsque le facteur de compacité est atteint, on suppose que la surface effective des grains, S_e , avance à la même vitesse pour tous les grains. Suivant les travaux de Zou, la surface effective et l'accroissement de la fraction solide s'expriment selon les relations suivantes:

$$S_e = 4\pi R^2 \cdot \Psi(\alpha) \quad (69.)$$

$$\Delta f_s = S_e \cdot \Delta R \cdot n \quad (70.)$$

Le facteur de pondération de la surface effective de l'interface liquide/solide, $\Psi(\alpha)$, varie entre 1 lorsqu'il n'y a pas d'interaction entre les grains ($R \leq R_{crit}$) et 0 lorsque la solidification est terminée ($f_s = 1$). Les résultats des différents calculs effectués par Zou pour l'arrangement dense et cubique simple sont donnés ci-après. Les valeurs critiques du rayon moyen et de la fraction solide sont également données au tableau 1.5:

Tableau 1.5 Valeurs critiques pour avoir interaction entre les grains

Type d'empilement	$f_{s,crit}$	R_{crit}
Cubique à faces centrées (CFC)	$\frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74$	$\left(\frac{\sqrt{2}}{8} \cdot \frac{1}{n}\right)^{1/3} \quad (71.)$
Cubique simple	$\frac{\pi}{6} \approx 0.52$	$\left(\frac{1}{8n}\right)^{1/3} \quad (72.)$

Arrangement dense (cubique à face centrée):

Tel qu'illustré à la figure 1.16, la surface effective est calculée pour quatre situations possibles: a) les grains ne se touchent pas, b) les grains se touchent mais le liquide intergranulaire est interconnecté, c) les sites intergranulaires contenant les dernières zones non solidifiées forment des îlots isolés, d) seul les îlots des sites octaédriques ne sont pas totalement solidifiés. Ainsi, les quatre situations sont:

a) $R \leq R_{crit}$

$$\Psi(\alpha) = 1 \quad (73.)$$

$$b) \quad R_{crit} \leq R \leq \frac{2}{\sqrt{3}} R_{crit}$$

$$\Psi(\alpha) = 1 - 6(1 - \cos \alpha), \text{ avec } \cos \alpha = R_{crit} / R \quad (74.)$$

$$c) \quad \frac{2}{\sqrt{3}} R_{crit} \leq R \leq \sqrt{\frac{3}{2}} R_{crit}$$

$$\Psi = \left[7 - \frac{24}{\pi} \text{Arsin} \left(\frac{1}{2 \sin \alpha} \right) \right] - \cos \alpha \left[6 - \frac{12}{\pi} \text{Artg} \left(\frac{2\sqrt{3} \text{tg}^2 \alpha - 1}{3 \text{tg}^2 \alpha - 2} \right) \right] \quad (75.)$$

$$d) \quad \sqrt{\frac{3}{2}} R_{crit} \leq R \leq \sqrt{2} R_{crit}$$

$$\Psi = \left[3 - \frac{12}{\pi} \text{Arsin} \left(\frac{1}{2 \sin \alpha} \right) \right] - \cos \alpha \left[\frac{12}{\pi} \text{Artg} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) - \frac{6}{\pi} \text{Artg} \left(\frac{2\sqrt{3} \text{tg}^2 \alpha - 1}{3 \text{tg}^2 \alpha - 2} \right) \right] \quad (76.)$$

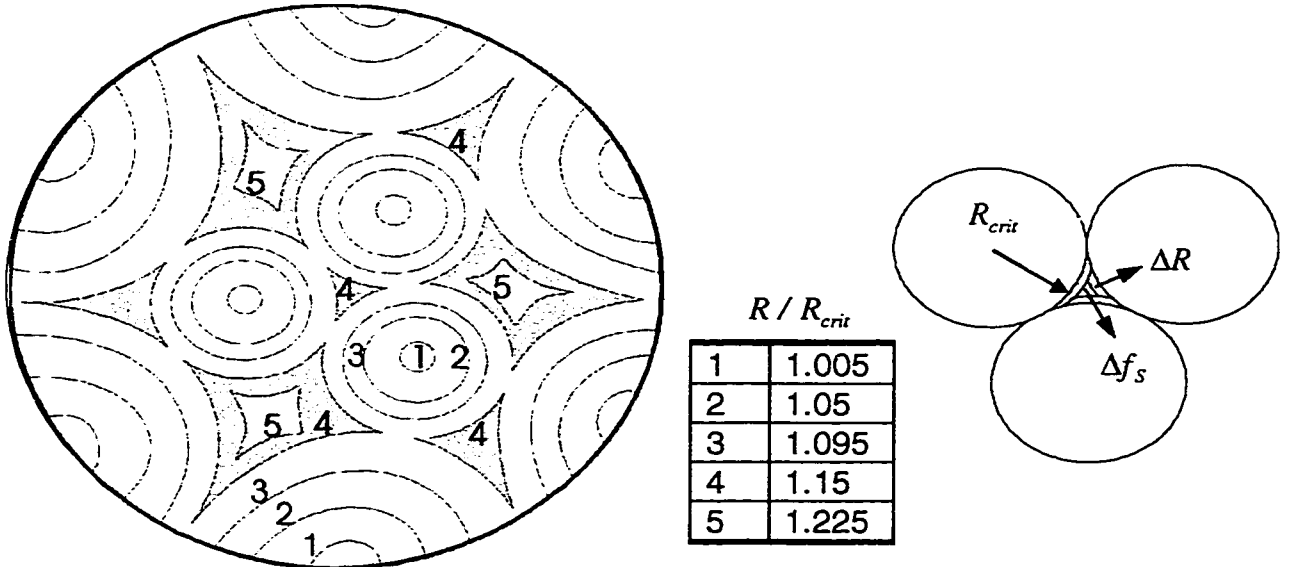


Figure 1.16 Projection stéréographique des grains en contact avec le liquide pour l'empilement compact²⁶

Arrangement cubique simple:

La figure 1.17 montre une projection stéréographique de l'arrangement cubique simple. Suivant le rapport R/R_{crit} , on trouve:

$$\begin{aligned} \text{a) } R &\leq R_{crit} \\ \Psi(\alpha) &= 1 \end{aligned} \quad (77.)$$

$$\begin{aligned} \text{b) } R_{crit} &\leq R \leq \sqrt{2}R_{crit} \\ \Psi(\alpha) &= 1 - 3(1 - \cos\alpha), \text{ avec } \cos\alpha = R_{crit}/R \end{aligned} \quad (78.)$$

$$\begin{aligned} \text{c) } \sqrt{2}R_{crit} &\leq R \leq \sqrt{3}R_{crit} \\ \Psi &= \frac{12}{\pi} \left\{ \frac{\pi}{3} + \frac{\cos\alpha}{2} \text{Arcos} \left[2\text{ctg}\alpha \sqrt{1 - \text{ctg}^2\alpha} \right] - \text{Arsin} \left(\frac{1}{\sqrt{2} \sin\alpha} \right) \right\} \end{aligned} \quad (79.)$$

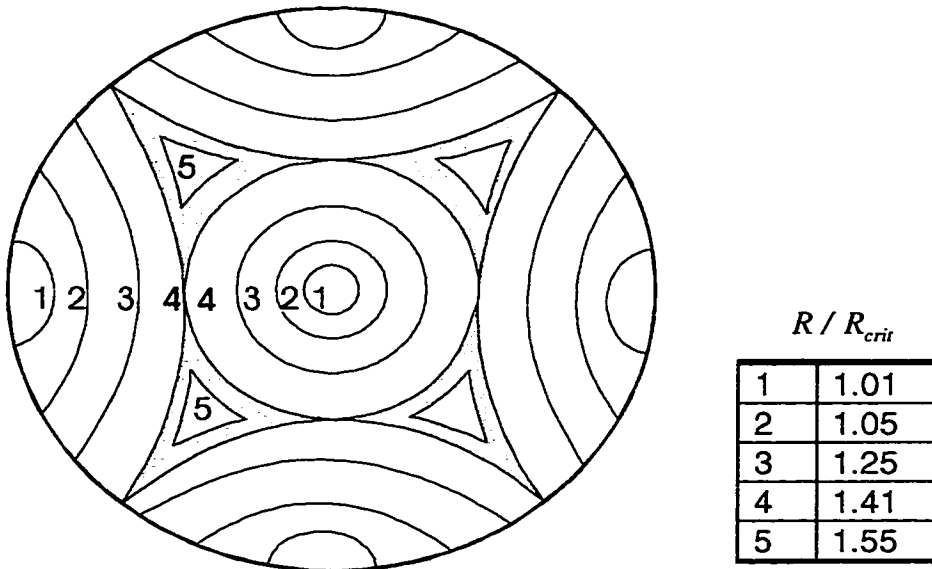


Figure 1.17 Projection stéréographique des grains en contact avec le liquide pour l'empilement cubique simple²⁶

1.4 Modélisation de la solidification des alliages à composants multiples

Les modèles décrits précédemment ont été développés pour les alliages binaires. Par ailleurs, la majorité des alliages commerciaux ont plusieurs éléments en importance, d'où la nécessité d'élargir le champs d'application de ces modèles aux mélanges à composants multiples. Selon Wang et al.⁴⁷, le modèle de LGK (Lipton-Glicksman-Kurz)^{5,48,49} décrivant la vitesse de croissance de la pointe de la dendrite peut s'étendre aux alliages à composants multiples comme les alliages ternaires. Pour une vitesse de croissance v_g donnée, la surfusion totale ΔT_{tot} requise est donnée par

$$\Delta T_{tot} = \sum \left\{ m_{L,i} \cdot C_0^i \cdot \left[1 - \frac{1}{1 - (1 - k_i) \cdot I_v(Pe_c)} \right] \right\} + \frac{2\Gamma}{R_d} + \theta \cdot I_v(Pe_{th}) \quad (80.)$$

où le premier terme est la contribution de la diffusion sur la surfusion pour chacun des éléments de l'alliage, puisque le soluté est rejeté en avant du front de solidification, le second terme correspond à la contribution de capillarité due à la courbure de l'interface solide/liquide et le dernier terme correspond à la contribution thermique rejetée à l'extrémité de la dendrite.

Les $m_{L,i}$ et k_i sont respectivement la valeur absolue de la pente du liquidus et le coefficient de partition du diagramme d'équilibre de la composante i . $I_v(Pe_c)$ est la fonction d'Ivantsov en fonction du nombre de Péclet chimique. Ainsi, le rayon de l'extrémité de la dendrite est donné par la relation suivante:

$$R_d = \frac{4\pi^2 \cdot \Gamma}{\frac{Pe_c \cdot \varphi}{\eta} - \sum \left\{ \frac{2Pe_c \cdot m_{L,i} \cdot C_0^i \cdot (1 - k_i)}{1 - (1 - k_i) \cdot I_v(Pe_c)} \right\}} \quad (81.)$$

où φ est l'unité thermique de la surfusion et η le rapport de la diffusivité définis par

$$\varphi = \frac{L}{(\rho c_p)}$$

$$\text{et } \eta = \frac{\alpha_{th}}{D_L} \quad (82.)$$

De plus, la diffusivité thermique α_{th} est calculée par

$$\alpha_{th} = \frac{\kappa}{(\rho c_p)} \quad (83.)$$

et le terme $I_v(Pe_{th})$ est la fonction d'Ivantsov en fonction du nombre de Péclet thermique défini comme étant le rapport du nombre de Péclet chimique sur η .

Ainsi, la vitesse de croissance peut être calculée en fonction de la surfusion pour tous les éléments d'alliage en importance. En faisant la sommation des termes de surfusion en négligeant les effets de courbure, on obtient le coefficient de croissance modifié:

$$\mu = \frac{\sigma^*}{2} \left\{ \sum_{i=1}^n \left[\Gamma_i \left(\frac{m_{L,i} (k_i - 1) \tilde{C}_{L,i}^2 \rho_i}{D_{L,i} \sum_{j=1}^n \tilde{C}_{L,j} \rho_j} + \frac{\rho L}{\kappa_L} \right) \right] \right\}^{-1} \quad (84.)$$

avec

$$\Delta T = T_m + \sum_{i=1}^n m_{L,i} \cdot \bar{C}_{L,i} - \bar{T} \quad (85.)$$

où, n est le nombre d'éléments dans l'alliage ayant une contribution significative.

Comme montré à la section 1.3.3, Rappaz et Thévoz ont proposé un modèle pour déterminer la fraction solide interne, f_{inter} des grains dendritiques équiaxes. Pour les alliages à composants multiples, elle doit être calculée pour chacun des éléments en présence⁵⁰. La majorité des alliages peut être traitée comme étant des systèmes dilués. Ainsi, Zou et Doherty ont supposé que la fraction volumique interne totale, $f_{inter, total}$ était la somme des fractions internes calculée pour chaque élément i :

$$f_{inter, total} = \sum_{i=1}^n f_{inter, i} = \sum_{i=1}^n \Omega_{c, i} \quad (86.)$$

avec,

$$\Omega_{c, i} = Pe_{c, d, i} = \frac{R_d \cdot v_{g, d}}{2D_{l, i}} \quad \Leftrightarrow \quad \text{pour une croissance sphérique} \quad (87.)$$

$$\Omega_{c, i} = Pe_{c, e, i} = \frac{\lambda \cdot v_{g, e}}{2D_{l, i}} \quad \Leftrightarrow \quad \text{pour une croissance eutectique} \quad (88.)$$

Lorsque les grains commencent à se toucher, débute l'étape de la maturation. Au cours de cette étape, la relation entre la fraction volumique de solide et la température au liquidus peut être établie en considérant l'effet de chaque élément de l'alliage. Pour un élément i , le changement de température, ΔT_i est défini comme étant $m_{L, i} \cdot \Delta C_{L, i}$ où $\Delta C_{L, i}$ est la différence de composition égale à $C_0^i - C_{L, i}$. Pour un élément i , la relation entre la température et la fraction de solide peut être réécrit en substituant l'équation de Scheil:

$$T = T_L - \sum_{i=1}^n \left\{ m_{L, i} \cdot C_{0, i} \cdot (1 - (1 - f_S)^{(k_i - 1)}) \right\} \quad (89.)$$

où T_L est la température au liquidus de l'alliage

Approche du diagramme d'équilibre équivalent:

À partir des travaux de Rappaz et Thévoz³⁸, développés pour les alliages binaires, Wang⁴⁷ et al. ont proposé une autre approche basée sur les diagrammes d'équilibre de chacun des éléments.

La concentration initiale en soluté équivalente est traitée comme étant la somme des concentrations pour tous les éléments d'alliage présents⁴⁷. Ainsi, on trouve

$$\bar{C}_0 = \sum C_0^i \quad (90.)$$

En négligeant les effets d'interaction entre les éléments, Cornelissen¹⁴ a suggéré une procédure pour déterminer les lignes du solidus et du liquidus non à l'équilibre. Ces équations s'expriment de la façon suivante:

$$T_L = T_m - \sum_i m_{L,i} C_0^i \quad (91.)$$

$$\text{et } T_S = T_m - \sum_i (m_{L,i} / k_i) \tilde{C}_{S,i} \quad (92.)$$

La pente du liquidus équivalente, \bar{m}_L , et le coefficient de partition équivalent, \bar{k} , pour l'alliage, sont calculés par l'intermédiaire d'une valeur moyenne pondérée⁴⁷:

$$\bar{m}_L = \frac{\sum (m_{L,i} \cdot C_0^i)}{\sum C_0^i} \quad (93.)$$

$$\text{et } \bar{k} = \frac{\sum (k_i \cdot m_{L,i} \cdot C_0^i)}{\sum (m_{L,i} \cdot C_0^i)} \quad (94.)$$

d'où l'équation de Scheil modifiée:

$$f_S = 1 - \left[\frac{T_m - T}{T_m - T_L} \right]^{\frac{1}{\bar{k}-1}}$$

1.5 Alliages hypoeutectiques

D'autres modèles ont été considérés afin de prendre en compte le comportement hypoeutectique d'une fonte grise. Dans le cas de la solidification d'une fonte hypoeutectique, (i.e. une fonte ayant une composition initiale inférieure à la composition eutectique) il y aura formation d'une phase primaire austénitique à la température du liquidus. La plupart des alliages commerciaux de fonte grise sont hypoeutectiques et débutent par la précipitation d'une structure dendritique au sein du liquide. La fraction solide, f_{aus} , associée à la formation de la phase austénitique est donnée par la règle du levier⁵⁸.

$$f_{aus} = \frac{1}{1-k} \cdot \frac{T - T_L}{T - T_\gamma} \quad (95.)$$

où k est le rapport entre la pente de la courbe du liquidus et celle du solidus, T_γ est le point d'intersection entre ces deux mêmes courbes, et T_L la température du liquidus.

Heine⁵⁹ a pu établir certaines corrélations entre ces paramètres et un diagramme d'équilibre ternaire. De cette façon, on peut traiter les fontes comme étant des alliages pseudo-binaires.

Les paramètres pseudo-binaires sont exprimés selon les relations suivantes:

$$T_L(^{\circ}C) = 1569.0 - 97.3(C_0^C + 0.25C_0^{Si}) \quad (96.)$$

$$T_s(^{\circ}C) = 1528.4 - 177.9(C_0^C + 0.18C_0^{Si}) \quad (97.)$$

$$T_\gamma(^{\circ}C) = 1618.0 - 15.0332 \cdot C_0^{Si} \quad (98.)$$

$$k = \frac{C_s}{C_L} = \frac{2.10 - 0.2165 \cdot C_0^{Si}}{4.26 - 0.3167 \cdot C_0^{Si}} \quad (99.)$$

La température d'équilibre eutectique, tenant compte de l'alliage ternaire Fe-C-Si est donnée par la relation

$$T_E[C_L^{Si}(f_s)] = T_E[C_0^{Si} = 0] + m_L^{Si} \cdot C_L^{Si}(f_s) \quad (100.)$$

et la composition du silicium par

$$C_L^{Si}(f_s) = C_L^0 (1 - f_s)^{-(1-k_s)} \quad (101.)$$

où, $T_E[C_0^{Si} = 0]$ est la température eutectique pour une concentration nulle de Si (alliage binaire) et m_L^{Si} la pente de la vallée eutectique.

Glover *et al.*⁶⁰ ont également trouvé une relation exprimant la température eutectique en fonction de la composition initiale de l'alliage. Cette relation est plus simple à utiliser du fait qu'elle n'est pas fonction de paramètres tirés du diagramme de phase. D'où,

$$T_E(^{\circ}C) = 1135.06 + 13.89 \cdot C_0^{Si} - 2.05 \cdot C_0^{Si^2}$$

Finalement, la fraction solide totale s'exprime comme étant la somme de la fraction solide austénitique et eutectique.

$$f_s = f_{aus} + f_{eur} \quad (102.)$$

La figure 3.5 montre l'évolution de la microstructure à différentes étapes de la solidification. Au début, il y a formation de germes austénitiques à partir de la phase liquide. Ensuite, ces germes croissent en dendrites jusqu'au moment où

la température atteint la température eutectique. À ce point, la germination eutectique débute et continue ainsi jusqu'au maximum de la surfusion. Finalement, la croissance et l'empiétement des grains se poursuivent jusqu'à la fin de la solidification.

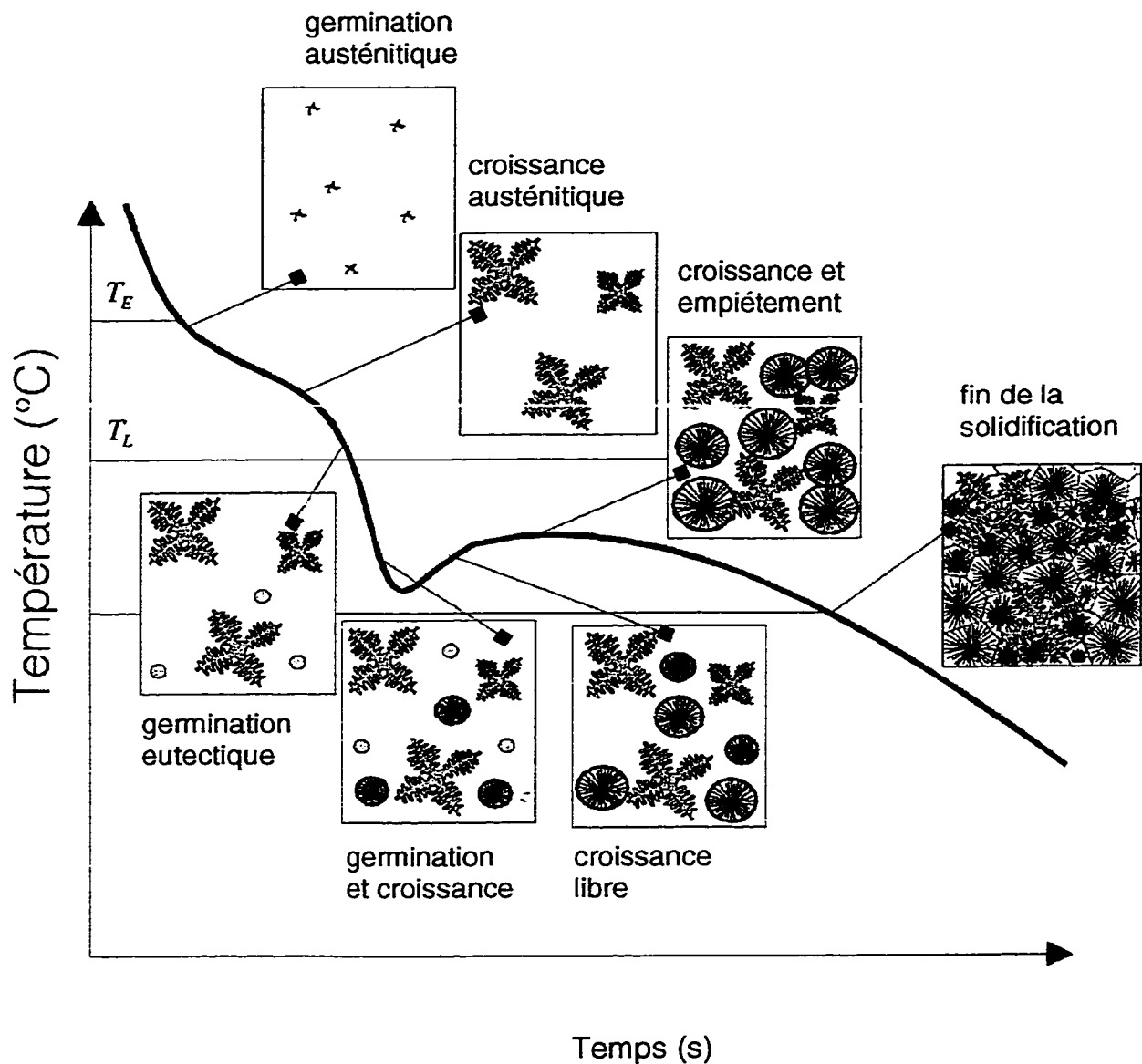


Figure 1.18 Évolution de la microstructure d'une fonte grise hypoeutectique pendant la solidification

1.6 Prédiction des propriétés mécaniques

Un des objectifs de la modélisation microstructurale est de prédire les propriétés mécaniques locales dans une pièce moulée. Il est possible de déterminer la contrainte ultime, dans les fontes grises, en utilisant le critère de rupture de Griffith sous la forme⁶¹:

$$\sigma_{ULTIME} = \frac{K_4}{\sqrt{c_{max}}} \quad (103.)$$

où, K_4 est une constante déterminée à partir de tests de rupture normalisés et est égal à $146.7 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ pour un fonte contenant environ 2% de Si et entre 3.1 et 3.5% de C. c_{max} représente la longueur maximale d'une lamelle eutectique à l'intérieur du grain.

En supposant que les lamelles eutectiques ne dépassent pas les frontières du grain, c_{max} peut être calculé numériquement par le rayon maximum de grain, R_g . Les données présentées par Bates ont également montré que la limite d'élasticité, σ_{elas} , étaient approximativement 0.8 fois la contrainte ultime. De plus, Goettsch⁵⁹ *et al.* ont montré que la longueur maximale des lamelles était 75-95% de celle du rayon maximum. C'est-à-dire,

$$c_{max} \approx 0.85 \times R_g \quad (104.)$$

Finalement, Bates donne une relation entre la contrainte ultime, le carbone équivalent et la dureté Brinell:

$$BHN = 0.0284 \cdot \sigma_{ULTIME} \cdot \exp(0.8228 \cdot CE) \quad (105.)$$

avec

$$CE = C_0^C + \frac{C_0^{Si}}{4} + \frac{C_0^P}{2} \quad (106.)$$

1.7 Synthèse des modèles décrivant la cinétique de transformation

Comme démontré précédemment, la cinétique de transformation des phases se présente à quatre niveaux: la germination des nouveaux grains, la croissance de l'enveloppe du grain, la diffusion du soluté en avant du front de solidification et l'empiétement des grains un sur l'autre.

Les modèles d'Oldfield et de Turnbull sont très facile à implanter mais la prise en compte de la densité initiales de sites de germination, n_0 , est nécessaire afin d'assurer qu'il n'y a pas plus de germes formés que de sites à leur disposition. Le modèle de germination instantanée de Kanetkar et Stefanescu est applicable seulement pour les cas où la surfusion est très faible ce qui n'est pas toujours le cas. Finalement, Thévoz *et al.* ont exprimé le taux de germination selon une distribution Gaussienne en faisant l'hypothèses que la germination se produit sur un grand nombre de sites. Ce modèle est très réaliste puisque de nombreux inoculants peuvent favoriser la formation de germes et il est très facile de caractériser les paramètres de ce modèle.

La formulation de la vitesse de croissance est pratiquement toujours la même. C'est-à-dire, la cinétique de croissance s'exprime en fonction de la surfusion par un polynôme du deuxième ou du troisième degré (excepté pour les fontes à graphites nodulaires). Les coefficients de croissance sont déterminés à partir de bilan de masse effectué à la pointe de la dendrite ou à la frontière du grain pour

les structures eutectiques. Selon la prise en compte des contributions de la surfusion, l'expression du coefficient devient plus complexe. Règle générale, la contribution de la surfusion du soluté est la plus importante.

Pour les structures dendritiques, l'interaction des grains est prise en compte à travers la formulation de la couche limite en soluté autour du grain ce qui n'est pas le cas pour le développement des structures équiaxes eutectiques. Dans ce cas, un modèle d'empiétement distinct doit être considéré. De plus, la fraction interne de liquide dans le grain est nulle pour les structures eutectiques puisque le grain est toujours complètement solide. Le premier modèle exprimé par Zou, selon lequel les grains peuvent s'organiser pour former un arrangement cubique simple, est le plus approprié. Le modèle d'Avrami ne considère pas la mobilité des grains et la fraction solide finale n'est pas nécessairement égale à l'unité. Le deuxième modèle de Zou (arrangement compact) surestime l'interaction entre les grains puisque en pratique la compacité de la structure des grains n'atteindra pas 74% à cause des différentes impuretés dans l'alliage.

CHAPITRE II MODÉLISATION MACROSCOPIQUE DU TRANSFERT DE CHALEUR

2.1 Hypothèses et principes fondamentaux

Dans cette section les principes de base de la conservation d'énergie et les hypothèses simplificatrices seront abordés.

A l'échelle macroscopique, c'est-à-dire à l'échelle du procédé, la solidification du métal est premièrement contrôlée par la diffusion de chaleur et dans certains cas par la convection dans le liquide. La modélisation macroscopique permet de modéliser les profils de température à différents moments lors de la solidification.

Dans plusieurs procédés de solidification comme dans les procédés de moulage, la phase solide demeure fixée dans l'espace. Cependant, dans d'autres procédés, (coulée continue, soudage, traitement au laser ...) la phase solide peut être transportée selon une vitesse connue, v_s . Dans ce chapitre et les suivants, seuls les principes reliés aux procédés de moulage conventionnel seront énoncés. On supposera alors une vitesse de la phase solide nulle.

Pour simplifier le problème, les effets convectifs thermiques et reliés au mouvement du soluté seront négligés dans le liquide. De plus, les propriétés physiques des matériaux en présence, en particulier la densité, la conductivité thermique et la chaleur spécifique, seront supposées indépendantes de la température. Finalement, aucune résistance thermique à l'interface pièce/moule ne sera considérée. Sous ces conditions, l'expression du bilan énergétique s'énonce de la façon suivante:

$$\nabla \cdot [k(T) \nabla T(\bar{x}, t)] = \rho \dot{H}[T(\bar{x}, t)] \quad \text{dans } \Omega \quad (107.)$$

où l'enthalpie massique, H , est défini par

$$H[T(\bar{x}, t)] = \int_{T_0}^T C_p T(\bar{x}, t) dT + L(1 - f_s[T(\bar{x}, t)]) \quad (108.)$$

L'expression (97.) est résolue pour toutes températures $T(\bar{x}, t)$ sur le domaine Ω dans le temps t à partir des conditions initiales. Pour différentes raisons liées à l'analyse mathématique et aux méthodes numériques, cette formulation, dite enthalpique, peut être exprimée différemment. En appliquant la dérivée en chaîne sur le terme transitoire $\dot{H}[T(\bar{x}, t)]$, on obtient une formulation où la température seule apparaît explicitement comme inconnue. Cette formulation est appelée chaleur spécifique équivalente (ou apparente).

Ainsi,

$$\frac{\partial H}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \triangleq C_p^e(T) \frac{\partial T}{\partial t} \quad (109.)$$

avec

$$C_p^e(T) = (C_p - L \frac{\partial f_s[T(\bar{x}, t)]}{\partial T}) \quad (110.)$$

on trouve

$$\nabla \cdot [k \nabla T(\bar{x}, t)] = \rho C_p^e(T) \dot{T}(\bar{x}, t) \quad (111.)$$

Dans les méthodes de modélisation macroscopiques traditionnelles, les relations entre $f_s(T)$, $C_p^e(T)$ et $H(T)$ peuvent être déterminées à partir de mesures sur un appareil de type DTA (Differential Thermal Analysers) ou à partir de modèles de microségrégation proposés par Scheil, Brody ou Flemings (voir section 1.2). Le choix de la formulation dépend de la variable dépendante considérée dans l'équation de conservation d'énergie. Dans la formulation chaleur spécifique équivalente, la température est la variable dépendante alors que dans

l'approche enthalpique, c'est l'enthalpie qui est la variable dépendante^{5,51,52,53,56}.

Finalement, lorsqu'on développe la formulation enthalpique en isolant le terme de solidification en un terme source distinct on obtient la formulation chaleur latente également appelée formulation du terme source.

Or,

$$\dot{H}[T(\bar{x},t)] = \rho C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} - \rho L \cdot \frac{\partial f_s[T(\bar{x},t)]}{\partial t} \quad (112.)$$

d'où

$$\nabla \cdot [\kappa \nabla T(\bar{x},t)] = \rho C_p \dot{T}(\bar{x},t) - \dot{Q} \quad (113.)$$

avec

$$\dot{Q} = \rho L \frac{\partial f_s(\bar{x},t)}{\partial t} \quad (114.)$$

\dot{Q} , le terme source, représente la chaleur latente de fusion libérée pendant la solidification.

et

$$\dot{T} = \frac{\partial T(\bar{x},t)}{\partial t} \quad (115.)$$

Tel qu'illustré à la figure 2.1, il existe deux techniques de résolutions des équations macroscopiques afin de modéliser le changement de phase dans un procédé de solidification ^{5,51,52,53}:

1) Méthode à deux domaines ("Front tracking method")

2) Méthode à un seul domaine ("Averaging method")

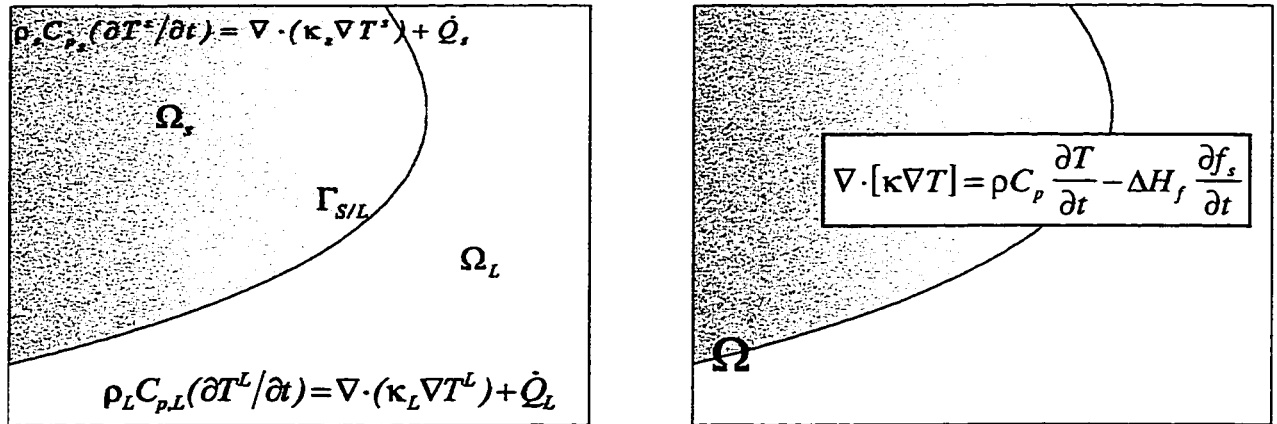


Figure 2.1 Schéma descriptif des méthodes de modélisation macroscopique de la solidification⁵¹. (a) Solution à deux domaines; (b) Solution à un domaine

L'approche à deux domaines est principalement utilisée afin de modéliser la solidification d'une substance pure sans intervalle de solidification. Ainsi, le changement de phase se produit selon une température de transformation bien défini et l'avancement de l'isotherme peut être suivi. Dans ce cas, les phases solide et le liquide sont considérés comme étant deux domaines distincts pour lesquels on applique les équations linéaires de conservation de masse et d'énergie. Le changement de phase est modélisé à l'interface par une condition limite et de continuité et en générale \dot{Q}_L et $\dot{Q}_s = 0$. Les équations différentielles, basées sur la méthode chaleur spécifique sont ci-bas présentées. L'équation de conservation d'énergie pour la phase solide est donnée par^{2,51,52,54,55}:

$$\rho_s C_{p,s} (\partial T^s / \partial t) = \nabla \cdot (\kappa_s \nabla T^s) + \dot{Q}_s \quad (116.)$$

et pour la phase liquide, par:

$$\rho_L C_{p,L} (\partial T^L / \partial t) = \nabla \cdot (\kappa_L \nabla T^L) + \dot{Q}_L \quad (117.)$$

À l'interface solide/liquide, le changement de phase se produit à la température de fusion du métal, T_m . On a alors les phases solide et liquide séparées par une interface définie par les conditions suivantes:

Deux conditions doivent aussi être satisfaites à l'interface.

- Premièrement, la température à l'interface solide/liquide doit être continue, égale à T_m , $T_m^L = T_m^S$;
- Le bilan d'énergie doit être satisfait à l'interface.

À noter que cette technique présente certaines difficultés comme par exemple le traitement de l'équation d'énergie de l'interface lorsque les interfaces sont multiples ou oscillantes.

L'approche à un domaine est principalement utilisée afin de modéliser la solidification des alliages ayant un intervalle de solidification, alliages typiques de fonderie. Les phases solide et liquide sont ici considérées comme faisant partie du même domaine. Pour cette approche, la formulation mathématique est obtenue à partir de la formulation faible qui, implicitement contient l'information pour traiter les fronts de solidification. Selon la méthode choisie, les expressions mathématiques sont exprimées directement selon les équations (107.), (111.) ou (113.).

Lorsqu'on considère la convection dans le liquide, un terme de transport doit être ajouté à l'équation de conservation énergétique. Ce qui donne:

$$\nabla \cdot [k \nabla T(\bar{x}, t)] - \rho v(\bar{x}, t) \nabla H(\bar{x}, t) = \rho \dot{H}(\bar{x}, t) \quad (118.)$$

où, $v(\bar{x}, t)$ est déduit des équations de Navier-Stokes.

2.2 Conditions aux frontières

Les conditions aux frontières sont généralement de trois types^{56,57}.

(1) la température est spécifiée à la frontière (Condition de Dirichlet);

(2) un flux de chaleur imposé à la frontière (Condition de Neumann)

(3) généralement, on utilise un troisième type de conditions limites qui exprime la résistance thermique à l'interface avec un coefficient de transfert de chaleur (Condition de Cauchy):

$$q_{conv} = -k \frac{dT}{dx} \Big|_{x=frontière} = h_c (T - T_{amb}) \quad (119.)$$

Où h_c est le coefficient de transfert de chaleur à l'interface et T_{amb} la température ambiante.

2.3 Méthode numérique

Dans ce mémoire, le logiciel CastSol, développé à l'Institut des matériaux industriels, sera utilisé pour résoudre le problème de transfert de chaleur au niveau macroscopique. Ce logiciel utilise la méthode des éléments finis (MEF). Cette méthode est de plus en plus populaire pour une bonne raison. Contrairement à la méthode des différences finis (MDF), les éléments sont en mesure d'épouser avec une très grande précision les formes complexes d'une pièce. La MEF est beaucoup plus souple en matière de discrétisation spatiale car elle permet d'utiliser des éléments plus variés comme des triangles ou des quadrangles (2D) et des tétraèdres ou des hexaèdres (3D). Les principales

étapes de la méthode des éléments finis sont présentées aux paragraphes suivants:

1 - Définition du problème au sens fort

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \rho \dot{q} \quad \text{dans } \Omega \times]0, T[\quad (120.)$$

$$\text{avec } T = T(\bar{x}) \quad \text{sur } \Gamma_T \times]0, T[\quad (121.)$$

$$\kappa \frac{\partial T}{\partial n} = h_c (T - T_{amb}) \quad \text{sur } \Gamma_c \times]0, T[\quad (122.)$$

$$T = T_i(\bar{x}, 0) \quad \text{à } t = 0. \quad (123.)$$

où Ω est le domaine d'application fixé sur \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3 , Γ sont les surfaces où les conditions aux limites sont imposées, T est le temps final et n une direction normale.

2 - Formulation au sens faible

La formulation variationnelle est obtenue pour chaque élément en multipliant l'équation (109.) par une fonction test w et en intégrant les termes du second ordre par partie⁶².

$$\text{Soit } \vartheta = \{T \in H_0^1(\Omega) : T = 0 \text{ dans } \Omega; T = 0 \text{ sur } \Gamma_T\}, \quad (124.)$$

Trouver $T \in \vartheta$ tel que

$$\int_{\Omega} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} w d\bar{x} + \int_{\Omega} \kappa \nabla T \cdot \nabla w d\bar{x} = \int_{\Omega} \rho \dot{q} w d\bar{x} + \int_{\Gamma_c} h_c (T - T_0) w d\bar{s} \quad \forall w \in \vartheta. \quad (125.)$$

3. Discrétisation spatiale et temporelle

En choisissant un sous-espace $\mathfrak{V}_0^h \subset H_0^1(\Omega)$ et en supposant que le champ de température est exprimé comme une combinaison linéaire de la variable dépendante et d'un ensemble de fonctions d'interpolation $\phi_i(\bar{x})$ tel que

$$T^h(\bar{x}, t) = \sum_i T_i(t) \cdot \phi_i(\bar{x}) \quad \text{et} \quad (126.)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} \equiv \frac{T^n - T^{n-1}}{\Delta t} \quad \text{avec} \quad T^n = \sum_i T_i^n \cdot \phi_i \quad (127.)$$

L'équation (126.) représente l'approximation spatiale des variables $T^h(\bar{x}, t)$ pour un temps t . Alors, le problème variationnel discret revient à trouver $T_i \in \mathfrak{V}^h$ tel que

$$0 = \int_{\Omega} [\kappa \nabla T^h \cdot \nabla w^h] d\bar{x} + \int_{\Omega} \rho C_p \cdot \frac{T^n - T^{n-1}}{\Delta t} w^h d\bar{x} - \int_{\Omega} \rho \dot{q} w^h d\bar{x} - \oint_{\Gamma_c} h_c (T^n - T_{amb}) w^h d\bar{s} \quad \forall w^h \in \mathfrak{V}^h. \quad (128.)$$

La $i^{ème}$ équation différentielle du modèle par éléments finis est obtenue en substituant $w = \phi_j$ et en remplaçant dans l'équation (115.).

$$0 = \left[\int_{\Omega_e} \kappa \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j d\bar{x} \right] d\bar{x} \cdot \{T_j^n\} + \int_{\Omega} \rho C_p \frac{\phi_j T_j^n - \phi_j T_j^{n-1}}{\Delta t} \phi_i d\bar{x} - \int_{\Omega_e} \rho \dot{q} \phi_j d\bar{x} - \oint_{\Gamma_c} h_c (T^n - T_{amb}) \phi_j d\bar{s} \quad (129.)$$

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\rho c_p}{\Delta t} \phi_j \phi_i + \kappa \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \right] d\bar{x} \cdot \{T_j^n\} = \left\{ \int_{\Omega} \left[\frac{\rho c_p}{\Delta t} \phi_j \phi_i T_j^{n-1} + \rho \dot{q} \phi_j \right] d\bar{x} \right\} + \oint_{\Gamma_c} h_c (T^n - T_{amb}) \phi_j d\bar{s} \quad (130.)$$

Avec,

$$K_{i,j}^h = \int_{\Omega_c} \kappa \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j d\bar{x} \quad (131.)$$

$$M_{i,j}^h = \frac{\rho c_p}{\Delta t} \int_{\Omega_c} \phi_i \phi_j d\bar{x} \quad (132.)$$

$$bc_j^h = \oint_{\Gamma_c} h_c (T^n - T_{amb}) \phi_j d\bar{s} \quad (133.)$$

$$Q_j^h = \int_{\Omega_c} \rho \dot{q} \phi_j d\bar{x} \quad (134.)$$

Enfin, l'équation (113.) devient

$$\{M_{i,j}^h + K_{i,j}^h\} \cdot T_j^n = M_{i,j}^h \cdot T_j^{n-1} + Q_j^h + bc_j^h \quad (135.)$$

Afin de résoudre numériquement les systèmes d'équations données à la section précédente, il est nécessaire d'écrire les équations d'échange de chaleur sous la forme matricielle. Pour la formulation du terme source, on a

$$[M]\{T^n - T^{n-1}\} + [K(T)]\{T^n\} = [Q] + \{bc\} \quad (136.)$$

Cette dernière formulation sera utilisée lors du couplage de l'équation d'énergie décrivant le transfert de chaleur aux modèles microscopiques. Où,

$[K(T)]$: matrice de conductibilité
 $[M]$: matrice de masse
 $\{T\}$: vecteur de la température et de l'enthalpie pour tous les noeuds

$[Q]$: matrice de la chaleur libérée pour tous les noeuds
 $\{bc\}$: vecteur correspondant aux conditions frontières

Comme illustré à la figure 2.2, la courbe de l'enthalpie en fonction de la température montre une discontinuité à l'eutectique pour un alliage et au point de fusion pour une substance pure. La méthode enthalpique peut résoudre ce problème en considérant l'enthalpie comme étant la variable dépendante plutôt que la température.

Dans la méthode chaleur spécifique équivalente, la discontinuité de la courbe $C_p^e(T)$, présentée à la figure 2.2 peut être atténuée dans les calculs numériques en altérant la courbe de f_s . Cependant, il est difficile d'assurer la conservation de l'énergie en utilisant cette méthode. Les méthodes enthalpique et chaleur latente, même si elles sont plus difficiles à implanter, assurent la conservation de l'énergie. C'est pour cette raison qu'elles sont généralement préférées.

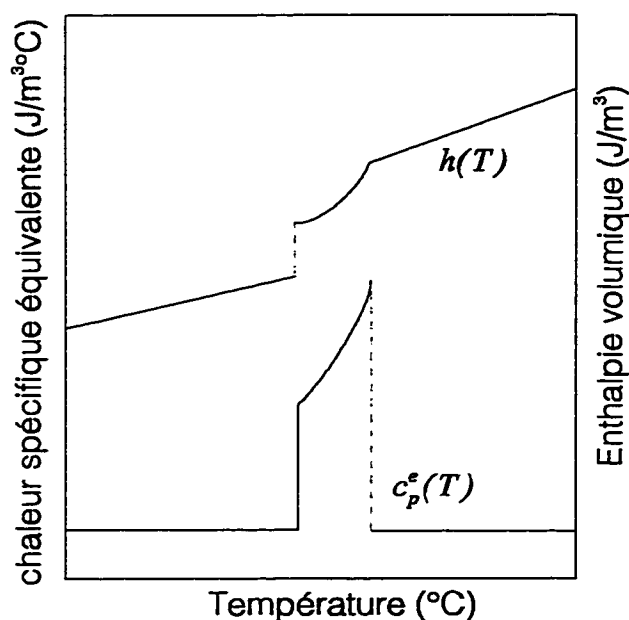


Figure 2.2 Relation entre la chaleur spécifique équivalente, l'enthalpie volumique et la température pour le cas d'un alliage binaire Al - Si⁵²

CHAPITRE III MODÉLISATION MICROSCOPIQUE DES STRUCTURES ÉQUIAXES

Ce chapitre expose les modèles qui seront utilisés pour décrire tout le processus de la solidification équiaxe pour les structures dendritiques et eutectiques. Le couplage utilisé pour modéliser la partie macroscopique est du type chaleur latente. Les différentes étapes du couplage micro/macroscopique incluant les organigrammes montrant les étapes du processus sont également présentées aux figures 3.2, 3.3 et 3.4. Cependant, seulement la solidification eutectique sera abordée aux chapitres subséquents.

3.1 Processus complet de la solidification équiaxe

La revue bibliographique présentée au chapitre 1 a permis de constater qu'un certain nombre de travaux ont été réalisés pour modéliser la solidification des structures équiaxes. Bien que la transformation des grains eutectiques équiaxes est assez bien définie dans la littérature, en particulier pour les fontes, très peu de travaux ont fait l'objet de la modélisation dendritique équiaxe. Les modèles qui seront utilisés pour décrire la cinétique de transformation des structures dendritiques sont basés sur les principes de croissance, de germination et de diffusion du soluté tels que développés par Thévoz et Rappaz. Dans ces modèles, on suppose que tous les grains ont une taille, une température et une fraction interne identiques à l'intérieur d'un même élément du maillage.

Afin d'évaluer le terme source de l'équation (113.), l'évolution de la fraction solide à l'intérieur d'un élément de volume, pour un temps t pendant la solidification équiaxe, est donnée par l'équation suivante:

$$f_s(t) = \int_0^t \dot{n}(\tau) \cdot \frac{4}{3} \pi R^3(\tau, t) \cdot f_{inter}(\tau, t) \cdot F(f_s) \cdot d\tau \quad (137.)$$

d'où la dérivée par rapport au temps,

$$\begin{aligned}
\frac{df_s}{dt} = & \dot{n}(\tau) \cdot \frac{4}{3} \pi R^3(\tau, t) \cdot f_{inter}(\tau, t) \cdot F(f_s) + \\
& \int_0^t \dot{n}(\tau) \cdot 4\pi R^2(\tau, t) \cdot \frac{\partial R(t, \tau)}{\partial t} \cdot f_{inter}(\tau, t) \cdot F(f_s) \cdot d\tau \\
& + \int_0^t \dot{n}(\tau) \cdot \frac{4}{3} \pi R^3(\tau, t) \cdot \frac{\partial f_{inter}(\tau, t)}{\partial t} \cdot F(f_s) \cdot d\tau
\end{aligned} \tag{138.}$$

Il est à noter que la fraction interne du grain, $f_{inter}(\tau, t)$, est égale à l'unité pour les structures eutectiques et que le facteur d'empiétement $F(f_s)$ est pris en compte dans le modèle de croissance de Thévoz et Rappaz. De plus, puisque la contribution du premier terme de l'équation (138.) (correspondant à l'accroissement de la fraction solide pendant la germination) est très faible, ce dernier sera négligé.

Or, la densité de grains et la vitesse de croissance sont données par

$$n(t) = \int_0^t \dot{n}(\tau) \cdot d\tau \tag{139.}$$

$$\text{et } \frac{\partial R(t, \tau)}{\partial t} = v_g(t) \tag{140.}$$

En définissant les termes:

$$\overline{R^2 \cdot f_{inter}} = \frac{1}{n(t)} \cdot \int_0^t \dot{n}(\tau) \cdot R^2(t, \tau) \cdot f_{inter}(t, \tau) \cdot d\tau \tag{141.}$$

$$\overline{R^3 \cdot \frac{df_{inter}}{dt}} = \frac{1}{n(t)} \cdot \int_0^t \dot{n}(\tau) \cdot R^3(t, \tau) \cdot \frac{df_{inter}(t, \tau)}{dt} \cdot d\tau \tag{142.}$$

En remplaçant les équations (141.) et (142.) dans (138.) et en supposant que la fraction interne de solide ne dépend pas de la taille des grains, on obtient:

$$\frac{df_s}{dt} = n(t) \cdot \left[4\pi \cdot \overline{R^2 \cdot f_{inter}} \cdot v_g(t) + \frac{4}{3}\pi \cdot \overline{R^3 \cdot \frac{df_{inter}}{dt}} \right] \cdot F(f_s) \quad (143.)$$

On constate que la variation de la fraction solide est due d'une part à la croissance des grains et d'autre part à la variation de la fraction interne de solide. Le calcul de la fraction solide exige de conserver en mémoire, à chaque temps t , le profil de la taille des grains à travers le maillage, le moment où les grains ont germé et de calculer la fraction interne de solide associée. Pour simplifier la notation, la taille moyenne de grain \overline{R} sera dénotée R_g .

Pour les structures eutectiques, on aura:

$$\frac{df_s}{dt} = n(t) \cdot \left[4\pi \cdot R_g^2(t) \cdot v_g(t) \right] \cdot F(f_s) \quad (144.)$$

Pour les structures dendritiques, on aura:

$$\frac{df_s}{dt} = n(t) \cdot \left[4\pi \cdot R_g^2(t) \cdot f_{inter} \cdot v_g(t) + \frac{4}{3}\pi \cdot R_g^3 \cdot \frac{df_{inter}}{dt} \right] \quad (145.)$$

Pour un pas de temps macroscopique, Δt , les principales étapes du calcul sont présentées ci-après. De plus, les organigrammes illustrant chacune des étapes du calcul sont également donnés à la figure 3.2 pour modéliser la partie macroscopique de la solidification équiaxe et aux figures 3.3 et 3.4 pour modéliser la partie microscopique de la solidification équiaxe dendritique et eutectique. Dans ces algorithmes, la formulation du terme source a été utilisée.

Une fois les conditions initiales, les propriétés physiques des matériaux en présence et les conditions aux limites spécifiées, le calcul macroscopique débute selon la formulation variationnelle donnée aux sections 2.4 et 2.5. La température moyenne associée à chacun des éléments de volume du maillage

est ensuite calculée à partir des sommets. Lorsque la température est connue, c'est-à-dire au temps t , on débute une boucle sur les éléments pour le calcul microscopique. Selon la structure de solidification, les tests suivants sont effectués:

- pour les alliages dendritiques, lorsque la température moyenne de l'élément est dans l'intervalle de solidification, $T_E < T \leq T_L$, il y a changement de phase et la solidification débute, sinon le terme source de l'équation d'énergie est nul. Par la suite, si la croissance est terminée, on passe aux calculs de cinétique de transformation. Cependant, si $f_s < 1$, on applique l'équation de Scheil pour le liquide interdendritique restant en supposant qu'il n'y a pas de diffusion du soluté dans la phase solide.
- pour les alliages de composition eutectique, si la température moyenne de l'élément est inférieure ou égale à la température eutectique, $T \leq T_E$, et que la solidification n'est pas terminée, $f_s \leq 1$, les calculs microscopiques débutent. Sinon, il n'y a pas de changement de phase et la variation de la fraction solide est nulle.

Lors du calcul microscopique, il est nécessaire d'imposer un petit pas de temps pendant tout le calcul ou bien de définir un nouveau processus de calcul à deux pas temps (voir figure 3.1). En effet, si l'on veut décrire adéquatement la variation de la fraction solide pendant la transformation de phase (en particulier pendant la germination), il faut avoir un nombre de pas de temps suffisant d'autant plus que la transformation se produit sur une courte durée. Lors du couplage micro/macrosopique, Thévoz affirme qu'il est nécessaire d'utiliser au minimum 50 à 100 pas de temps microscopiques, δt , pour obtenir des surfusions et des tailles de grains consistantes. L'utilisation de la méthode chaleur latente rend difficile l'application de ce processus car le temps est indexé

à travers le calcul macroscopique. Par contre, il est possible de contourner en partie ce problème. Lorsque la majorité des noeuds commence à se solidifier alors, on relance un nouveau calcul avec un pas de temps nettement plus petit.

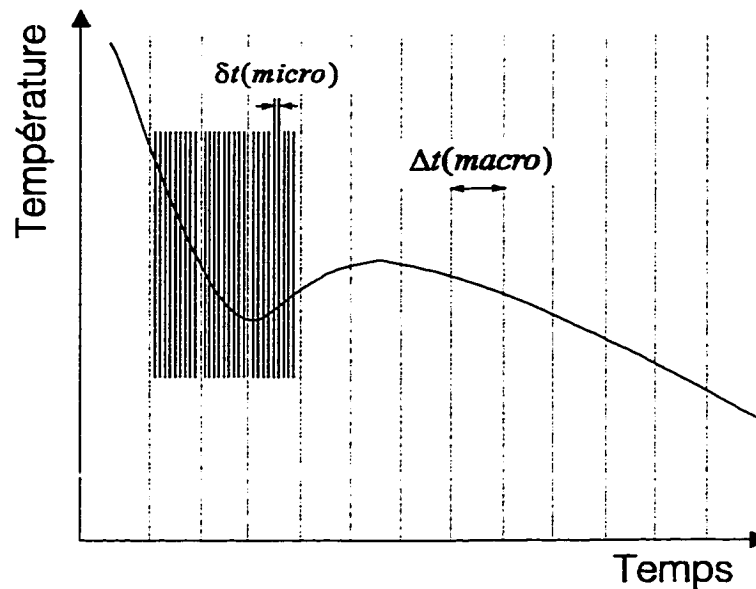


Figure 3.1 Processus de calcul à deux pas temps

La structure des organigrammes illustrée aux figures 3.3 et 3.4 est sensiblement la même dans les deux cas. Les principales différences proviennent des caractéristiques propres de la solidification dendritique comme la prise en compte de la couche limite autour du grain et de la fraction interne de liquide. De plus dans la modélisation eutectique, les modèles d'empiétement sont traités séparément contrairement à la modélisation dendritique où l'empiétement est considéré à l'intérieur de la couche limite.

Une fois les températures aux noeuds obtenues, la fraction solide est calculée explicitement à partir des surfusions à l'instant t . Le modèle de germination qui sera utilisé pour la modélisation est celui de Thévoz *et al.*^{23,24}. Ce modèle est très facile à implanter puisqu'il ne dépend que de la surfusion. Les paramètres n_0 , ΔT_N et ΔT_G sont beaucoup plus simples à déterminer que ceux des autres

modèles décrits au chapitre 1 (K_1 , K_2 , $fonct(\theta)$ et n_0) et les résultats concordent bien avec les observations expérimentales. Puisque la densité de grains est calculée seulement si la température est connue, le calcul de n est décalé d'un pas en arrière dans le temps. La densité de grains en fonction de la surfusion est donnée par

$$n(\Delta T) = \frac{n_0}{\sqrt{2\pi}\Delta T_\sigma} \int_0^{\Delta T} \exp\left[-\frac{(\Delta T' - \Delta T_N)^2}{2\Delta T_\sigma^2}\right] d(\Delta T') \quad (146.)$$

Lorsque la variation du taux de germination, $dn/d(\Delta T)$, est non nulle, le rayon du grain est mis à jour afin de conserver la fraction solide. (on néglige ainsi le volume des nouveaux germes formés). Ainsi, le rayon moyen est donné par

$$R_g^{*3}(t) = R_g^3(t) \cdot \frac{n(t - \Delta t)}{n(t)} \quad (147.)$$

Une fois les grains germés, le rayon du grain est recalculé en fonction de la nouvelle vitesse de croissance, v_g avec l'équation suivante:

$$R_g(t + \Delta t) = R_g^*(t) + v_g(t) \cdot \delta t \quad (148.)$$

Finalement, lorsque la variation de la fraction solide, df_s/dt , est trouvée, le terme source de l'équation d'énergie (113.) est mis à jour.

$$Q_{micro} = L \cdot \frac{df_s}{dt} \quad (149.)$$

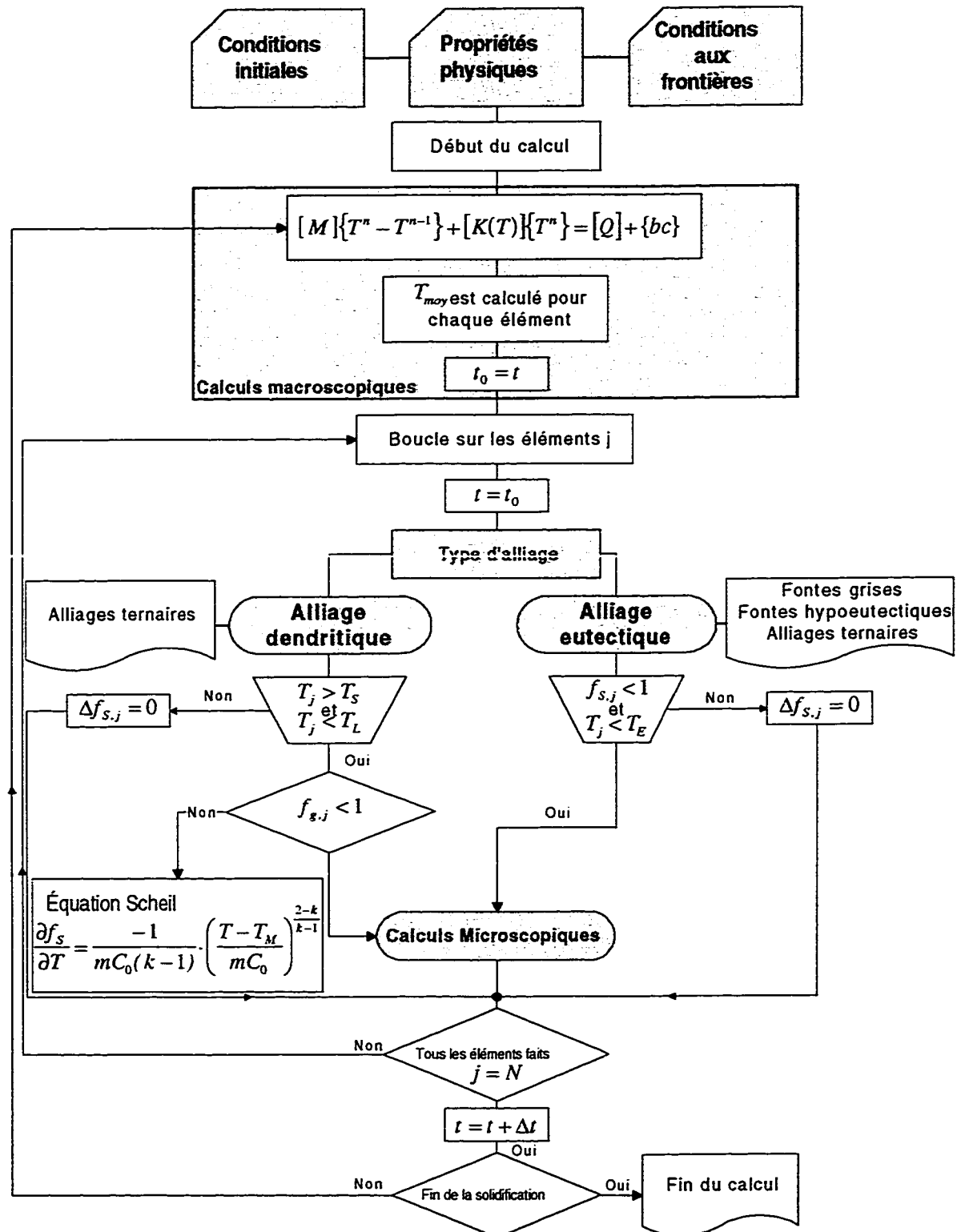


Figure 3.2 Organigramme de la modélisation macroscopique pour les structures équiaxes eutectiques et dendritiques

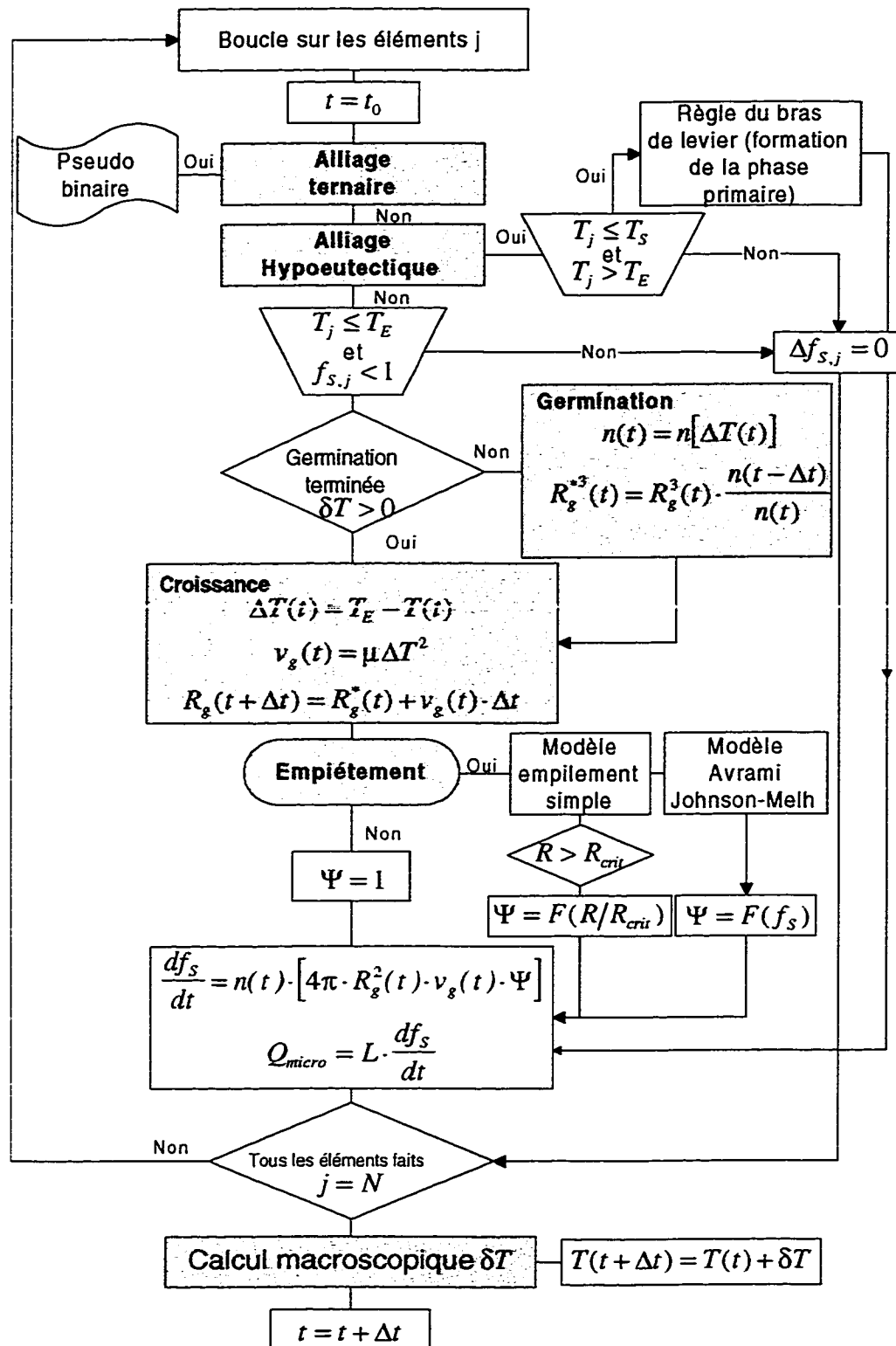


Figure 3.3 Organigramme de la modélisation microscopique pour les structures équiaxes eutectiques

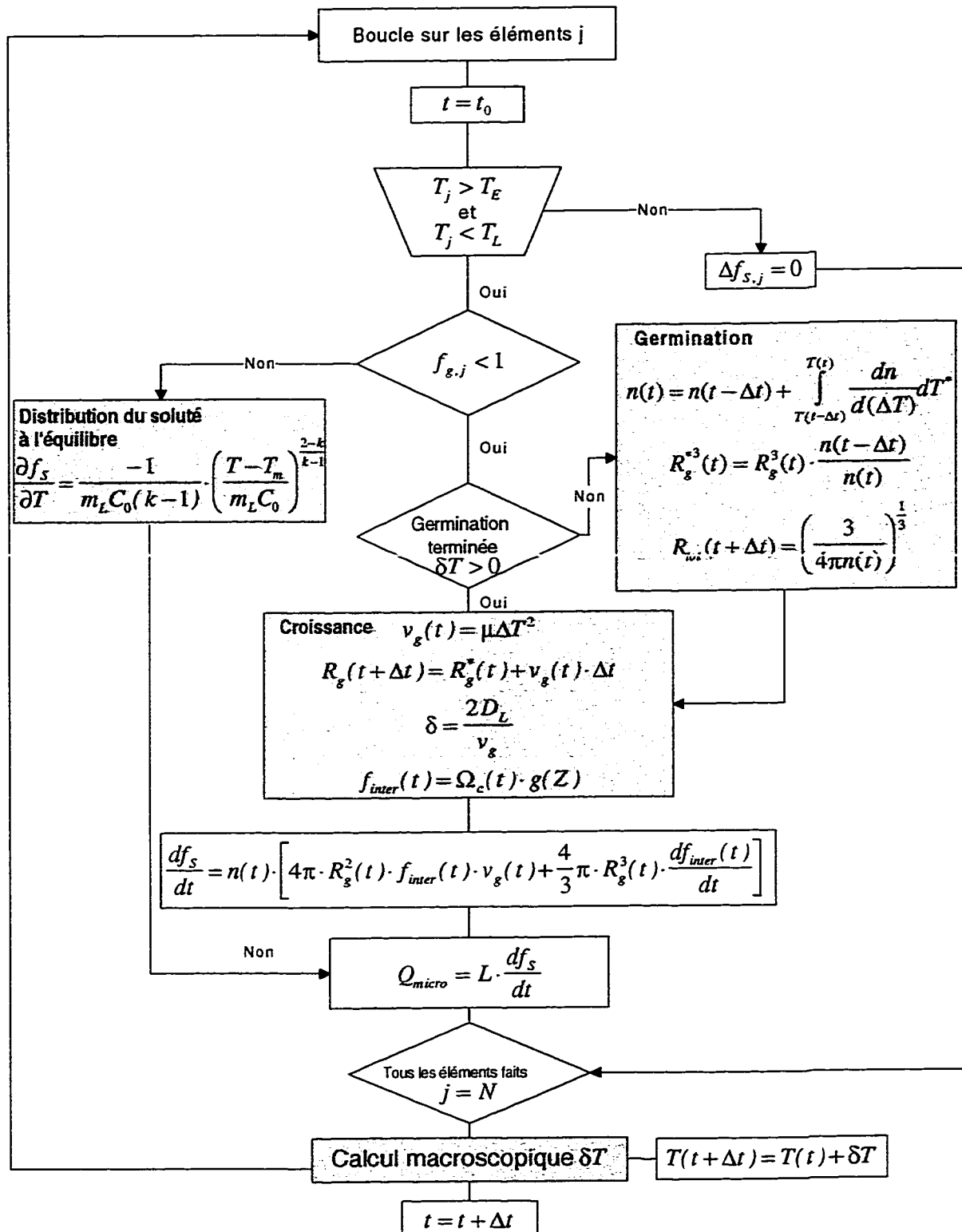


Figure 3.4 Organigramme de la modélisation microscopique pour les structures équiaxes dendritiques

CHAPITRE IV ANALYSE DES RÉSULTATS ET DISCUSSION

Dans ce chapitre, les résultats de la modélisation équiaxe eutectique effectuée sur trois cas tests sont présentés et comparés avec des résultats obtenus par d'autres auteurs. Les propriétés thermiques utilisées sont données à l'annexe A.

Dans un premier temps, les résultats de la solidification effectuée sur un barreau monodimensionnel seront montrés. L'objectif de ce calcul était d'imposer des conditions de refroidissement permettant de visualiser les principaux phénomènes microstructuraux à partir d'une courbe typique de refroidissement.

Par la suite, les résultats de l'analyse de la solidification d'un lingot monodimensionnel seront présentés et comparés avec ceux obtenus par un autre auteur et finalement une troisième étude effectuée sur une pièce comportant une série de cylindres différents (solidification étagée) sera mis en évidence. Les alliages utilisés sont respectivement un alliage eutectique dans le premier cas et deux alliages hypoeutectiques non inoculés dans les deux autres cas. Leur composition est présentée au tableau 4.1. La composition initiale de la fonte est nécessaire afin de déterminer les paramètres pseudo-binaires tels que décrit au chapitre 1.

Tableau 4.1 Composition des alliages utilisés pour les calculs^{26,58}

solidification	C (% pds)	Si (% pds)	P (% pds)	S (% pds)	Mn (% pds)
d'un barreau	3.84	0.13	0.051	-	-
d'un lingot	3.0	2.5	0.017	0.008	0.57
étagée	3.25	2.21	0.020	0.070	0.58

4.1 Barreau monodimensionnel

L'analyse effectuée sur le barreau monodimensionnel a pour but de montrer clairement l'aspect des courbes typiques de refroidissement (et des paramètres associés) obtenues lors de la solidification d'un alliage de morphologie équiaxe et non pas dans le but d'obtenir des résultats comportant une très grande précision. Pour cette raison, un barreau de 100 mm de longueur et 50 mm de largeur a été maillé avec seulement 12 éléments. Un coefficient de convection de $1.67\text{E-}04 \text{ W/mm}^2\text{°C}$ et une température de référence de 25°C ont été imposés sur une des extrémités permettant d'obtenir des résultats typiques d'une solidification à l'équilibre. Les figures 4.1 à 4.3 montrent quelques paramètres microstructuraux prédits pendant le calcul. Par exemple, sur la figure 4.1, on peut suivre l'évolution de la fraction solide, $f_s(t)$, de la vitesse de croissance, $v_g(t)$ ainsi que de la taille du grain eutectique, R_g . Une fois que les grains ont commencé à germer, la croissance est très rapide, la vitesse atteint un maximum et la fraction solide augmente rapidement. La chaleur générée, pendant le changement de phase arrête la germination et diminue la vitesse de croissance jusqu'à une valeur critique de rayon, R_{crit} , où la vitesse recommence à monter à cause de l'interaction entre les grains et la diminution de la surface effective entourant le grain.

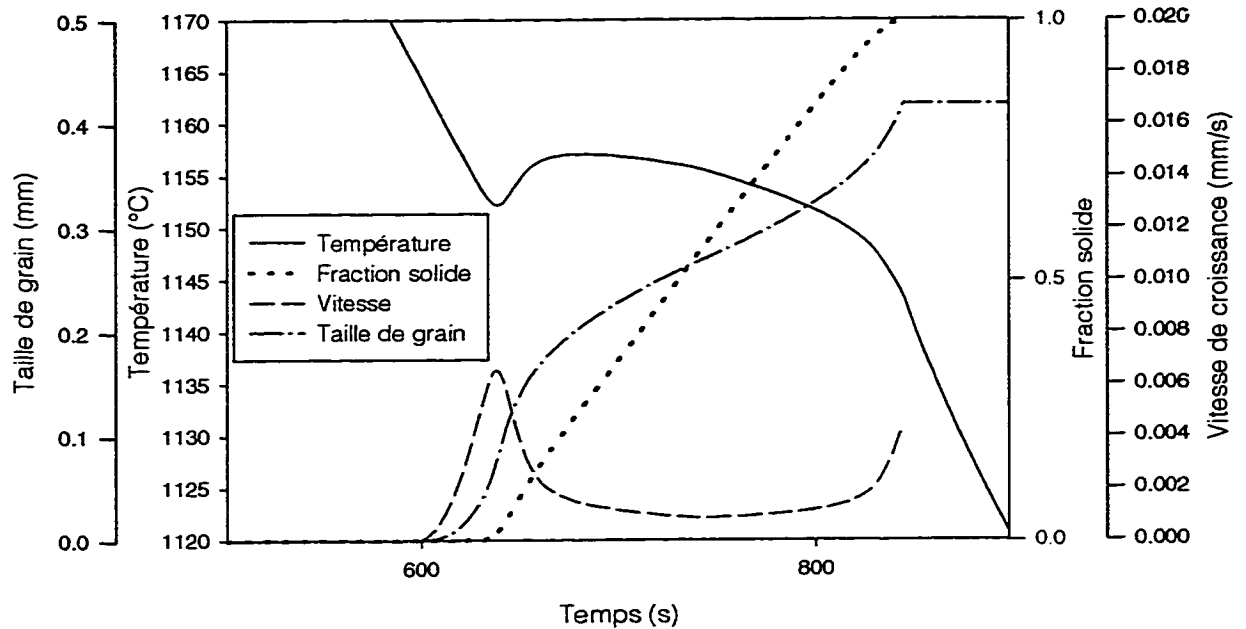


Figure 4.1 Prédiction de quelques paramètres microstructuraux: température avec surfusion et recalescence, taille de grain, fraction solide et vitesse de croissance ($x = 75$ mm)

Les figures 4.2 et 4.3 montrent la variation de la température globale, de la température d'équilibre eutectique, $T_E[C_L^{Si}(f_s)]$ et de la concentration en silicium de l'alliage ternaire Fe-C-Si, $C_L^{Si}(t)$ et finalement la variation de la fraction solide en fonction de la température. Sur cette dernière figure, l'effet de la surfusion maximale est assez évident sur la fraction solide.

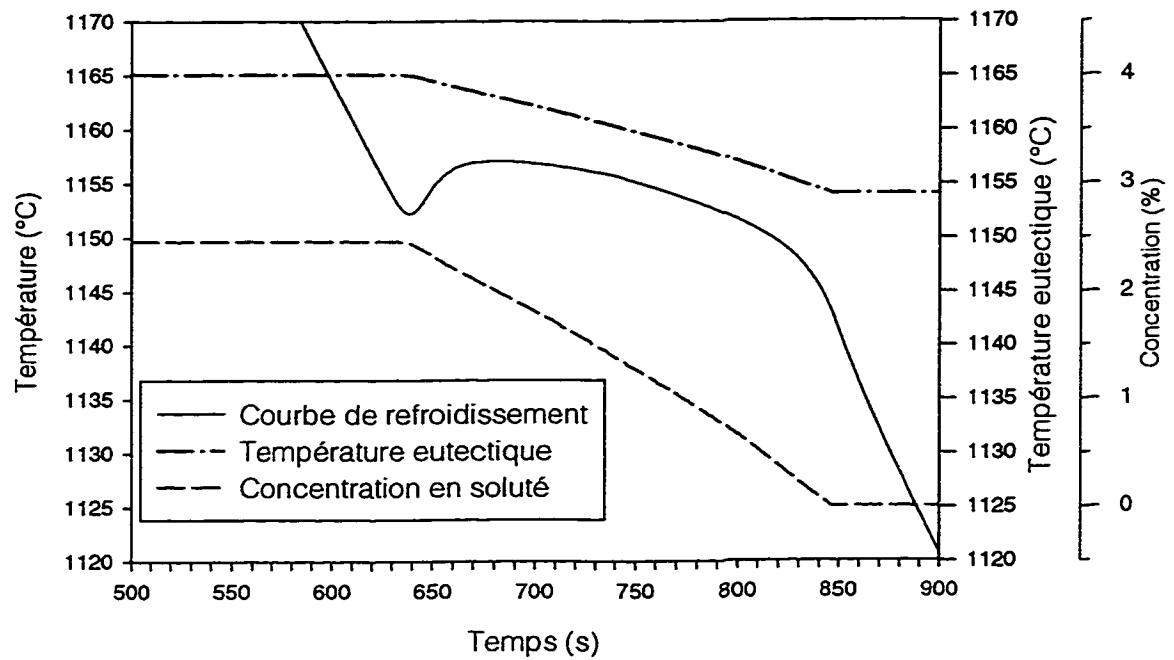


Figure 4.2 Prédiction de quelques paramètres microstructuraux: température avec surfusion et recalescence, la température d'équilibre eutectique et la concentration en silicium du liquide à l'interface ($x = 75 \text{ mm}$)

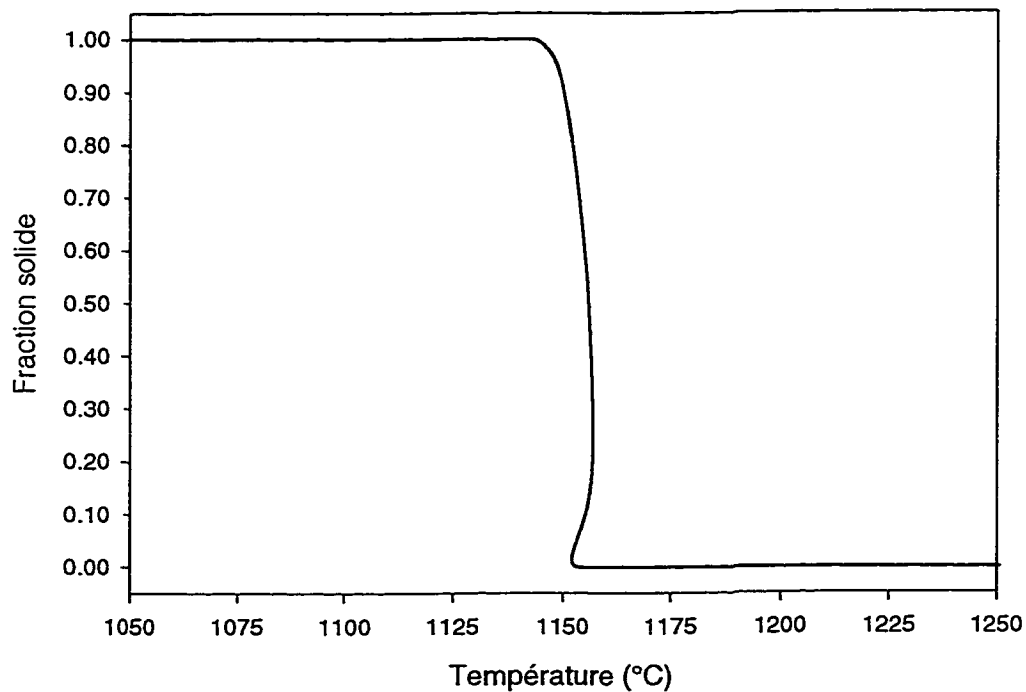


Figure 4.3 Prédiction de quelques paramètres microstructuraux: fraction solide en fonction de la température ($x = 75 \text{ mm}$)

Afin d'observer l'influence du modèle d'empiétement sur les courbes de refroidissement, différents modèles ont été comparés: l'empiétement cubique simple, le modèle d'Avrami $(1 - f_s)$ et un modèle d'Avrami modifié $((1 - f_s)^2)$. La figure 4.4 montre que les modèles peuvent atténuer considérablement les courbes de refroidissement. À ce stade, il est assez difficile d'affirmer avec certitude lequel de ces modèles donne de meilleurs résultats. Pour ce faire, il faudra tester davantage les différents facteurs d'atténuation avec des pièces plus complexes.

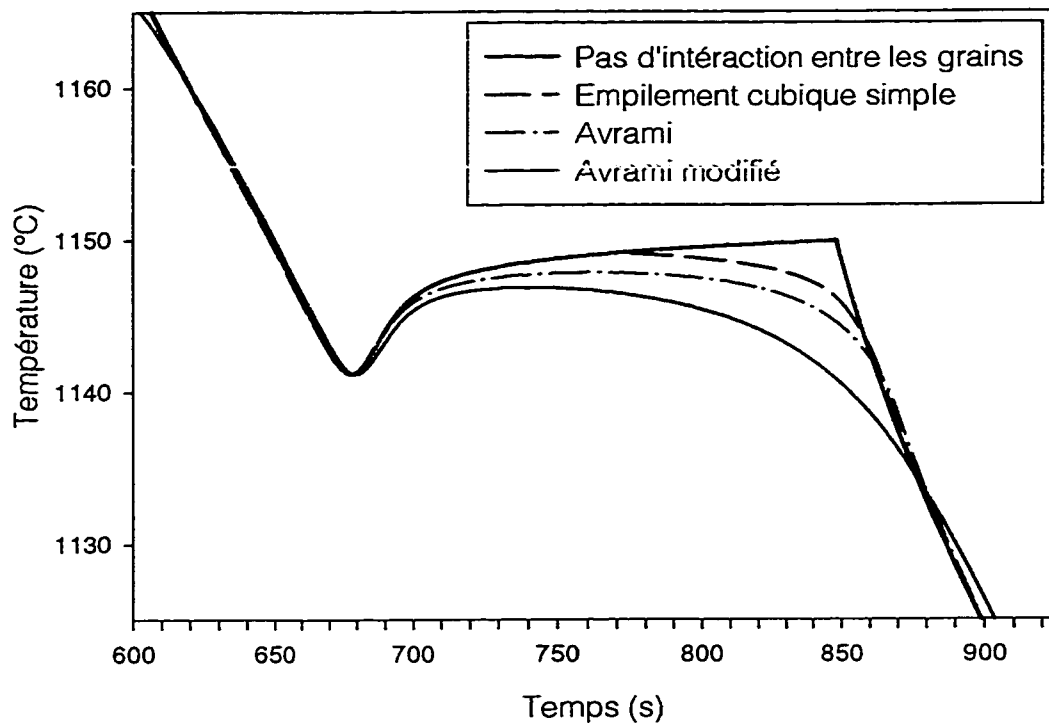


Figure 4.4 Modèles d'empiétement de grain

4.2 Solidification d'un lingot

Dans cette section, les résultats numériques de la solidification d'un lingot monodimensionnel seront comparés aux résultats obtenus par Zou³⁰. Pour fin de comparaison, la géométrie, les conditions frontières ainsi que les propriétés utilisées seront les mêmes. Sur le lingot, (voir figure 4.5) d'un côté un coefficient de convection simule l'effet d'un refroidisseur de cuivre refroidi à l'eau et de l'autre coté, une condition de rayonnement typique des fontes. De cette façon, le flux thermique sera fonction d'une seule direction. Le maillage utilisé comporte 3002 éléments tétraédriques linéaires et 720 noeuds. La température de coulée était de 1350°C.

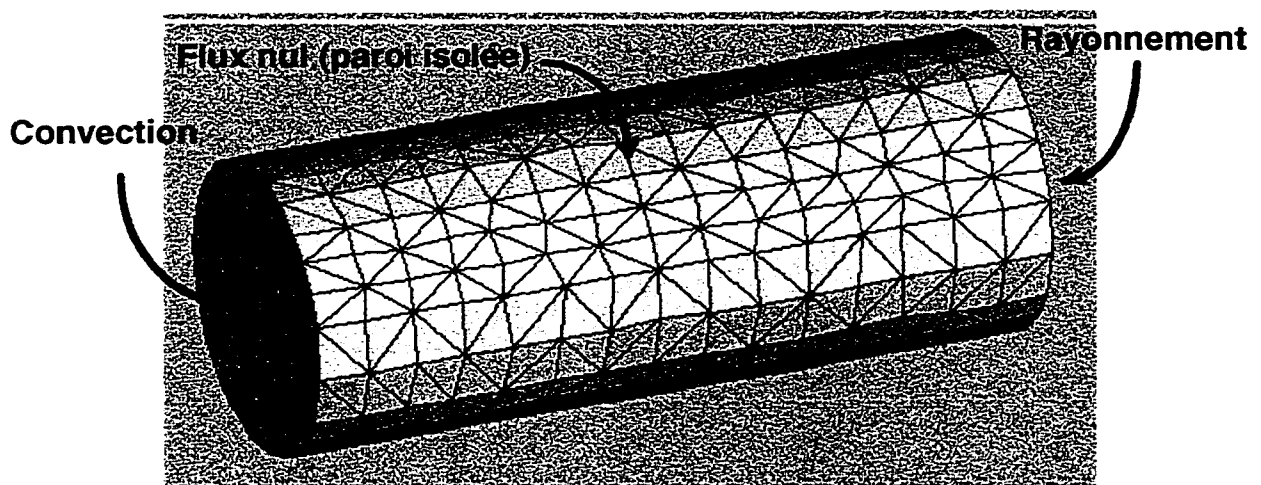


Figure 4.5 Géométrie du cylindre monodimensionnel (Longueur = 120 mm, Diamètre = 50 mm)

La figure 4.6 montre l'évolution dans le temps des conditions aux limites imposées pour le calcul. On remarque que le flux diminue très fortement près du refroidisseur dès le début de la solidification. Ce comportement est expliqué par le décollement du métal sur le moule lors de la solidification. Le flux de chaleur associé au rayonnement a été calculé à partir de l'équation suivante:

$$q_{rad} = -\sigma_{SB} \cdot \varepsilon \cdot [T(t)^4 - T_{amb}^4] \quad (150.)$$

Avec

$$\sigma_{SB} = 5.6705 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2 \text{ } ^\circ\text{C}^4, \quad \varepsilon \approx 0.35 \text{ et } T_{amb} = 25 \text{ } ^\circ\text{C}$$

La caractérisation de l'alliage Fe-C-Si a été effectuée par Zou²⁶ au laboratoire de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne. Les paramètres de cinétique de solidification caractérisés sont:

- les paramètres de germination du modèle de Rappaz et Thévoz:
 $\Delta T_N = 30.0 \text{ } ^\circ\text{C}$, $\Delta T_\sigma = 5.0 \text{ } ^\circ\text{C}$, $n_0 = 0.1050 \times 10^{11} / \text{m}^3$ requis par l'équation

$$(146.), \quad n(\Delta T) = \frac{n_0}{\sqrt{2\pi}\Delta T_\sigma} \int_0^{\Delta T} \exp\left[-\frac{(\Delta T' - \Delta T_N)^2}{2\Delta T_\sigma^2}\right] d(\Delta T')$$

- le coefficient de croissance $\mu_3 = 5.0 \text{ } ^\circ\text{C} \cdot \text{s}^{1/2} / \text{mm}^{1/2}$ requis par l'équation (31.),

$$v_g = \frac{\partial R}{\partial t} = \mu_3 \Delta T^2,$$

Les courbes de refroidissement calculées numériquement, selon les modèles micro/macrosopiques présentés au chapitre III, sont montrées à la figure 4.7. Ces courbes ont été superposées aux résultats expérimentaux obtenus par Zou pour différentes positions du refroidisseur de cuivre (10, 20, 40, 60, 80 et 100 mm).

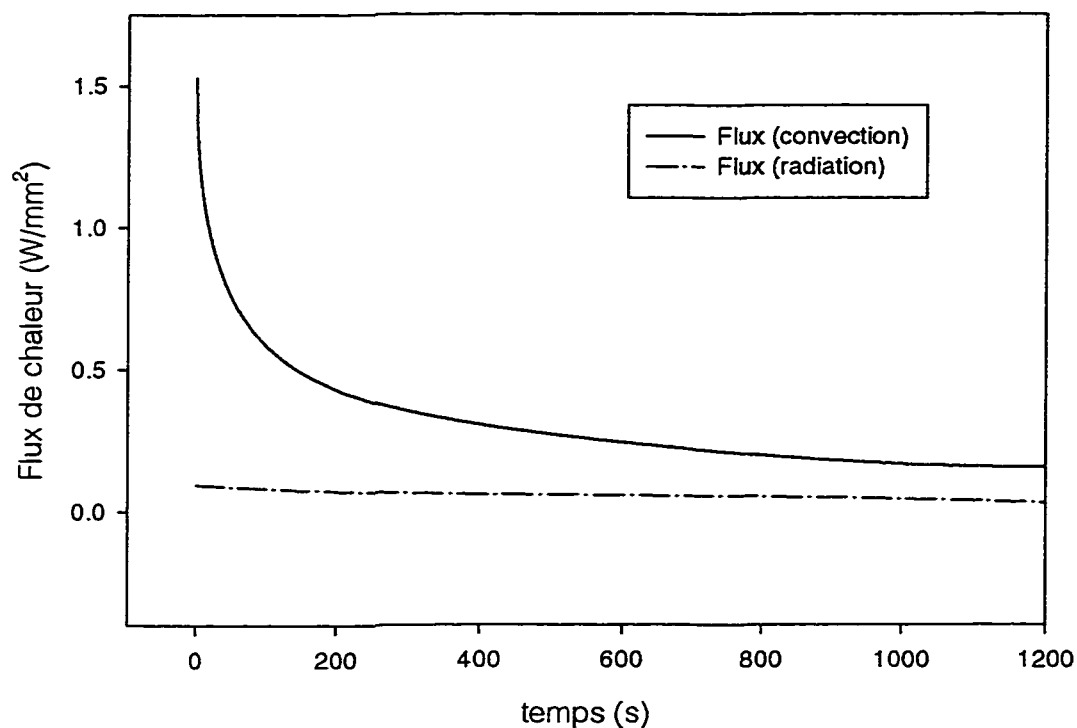


Figure 4.6 Conditions aux limites imposées sur les extrémités du cylindre

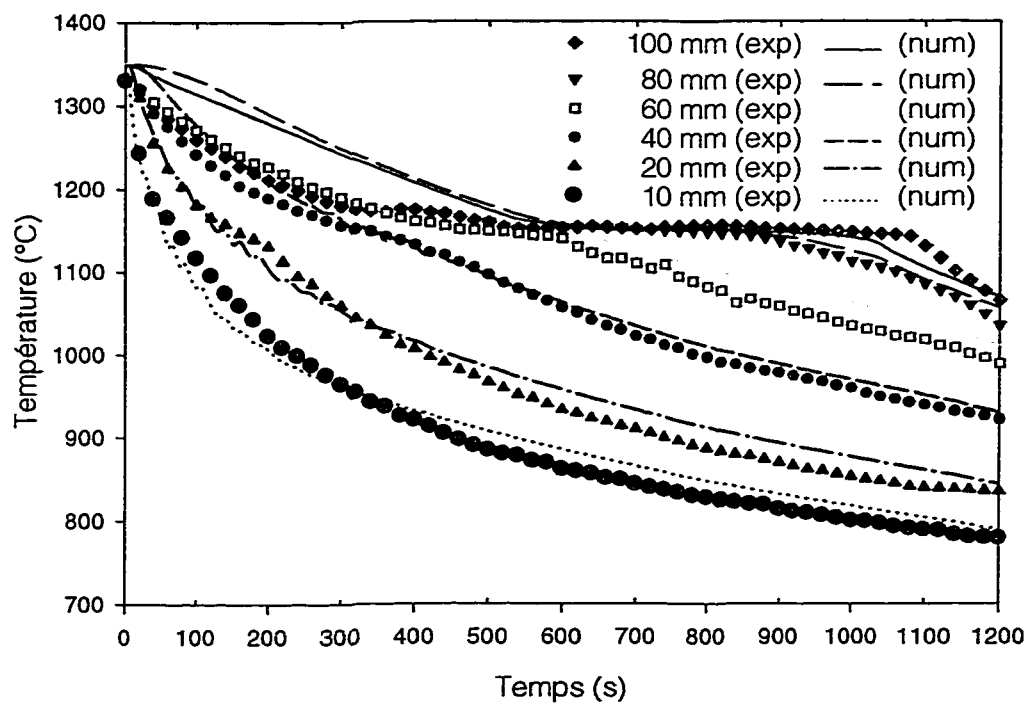


Figure 4.7 Courbes de refroidissement mesurées par Zou et calculées numériquement

Au niveau macroscopique, les températures prédites sont très proches des courbes expérimentales et les temps de solidification sont sensiblement les mêmes. On remarque par contre une surestimation des profils thermiques au-dessus de l'eutectique (1154°C). Zou a obtenu la même variation au début du calcul, selon lui, ce phénomène est associé à la perte de chaleur durant l'étape de l'écoulement dans la cavité. En regardant de près, on voit bien que les températures mesurées sont légèrement inférieures au temps $t = 0$ s. De plus, la convection dans la phase liquide n'a pas été prise en compte. On observe également un léger détachement de la courbe à 100mm vers la fin de la solidification par rapport aux données expérimentales. Ces écarts, aux extrémités sont probablement attribués à des conditions frontières mal posées. Par la suite, l'effet est atténué dans la masse. Il est à noter que la modélisation purement macroscopique aurait donnée des discontinuités marquées au voisinage du début et de la fin de la solidification. De plus, toute la transformation se serait produite à la température eutectique sans montrer de surfusion ni de recalescence.

Au niveau microscopique, à cause des conditions de refroidissement, l'effet de la formation de la phase primaire n'est visible que faiblement pour les températures situées à 80 et 100 mm. Numériquement, compte tenu des conditions aux limites, ce comportement n'est pas apparent.

En comparant les résultats de rayon et de densité de grain (voir les figures 4.8 et 4.9 respectivement) avec ceux calculés numériquement et expérimentalement par Zou, on constate que les modèles donnent des résultats similaires. Cependant, Zou ne tient pas compte de l'aspect hypoeutectique ternaire Fe-C-Si. Comme pour les courbes de refroidissement, on remarque une différence au niveau des valeurs obtenues à 100 mm du refroidisseur d'où l'hypothèse d'une condition à la frontière biaisée. De plus, les résultats de Zou peuvent comporter

certaines erreurs expérimentales. Les propriétés mécaniques prédites sont montrées à la figure 4.10 pour différentes distances du refroidisseur. Comme on pouvait s'y attendre, lorsque les taux de refroidissement sont faibles, les tailles de grains sont plus importantes et les propriétés mécaniques sont d'autant inférieures.

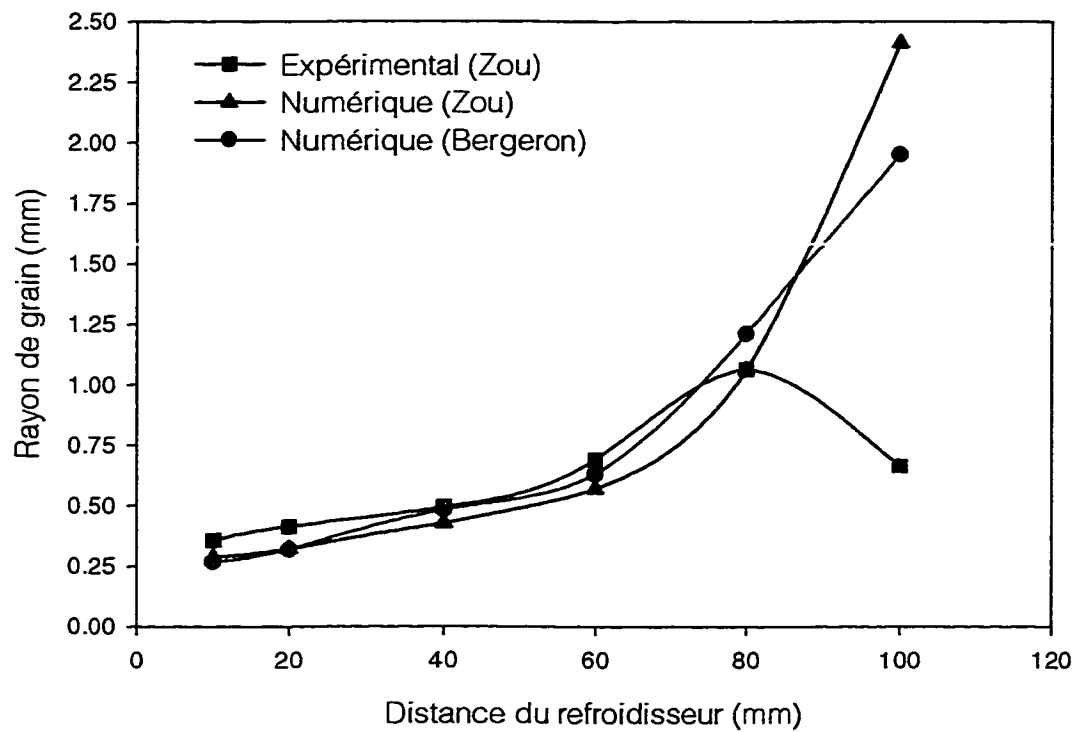


Figure 4.8 Comparaison des résultats - rayon de grain

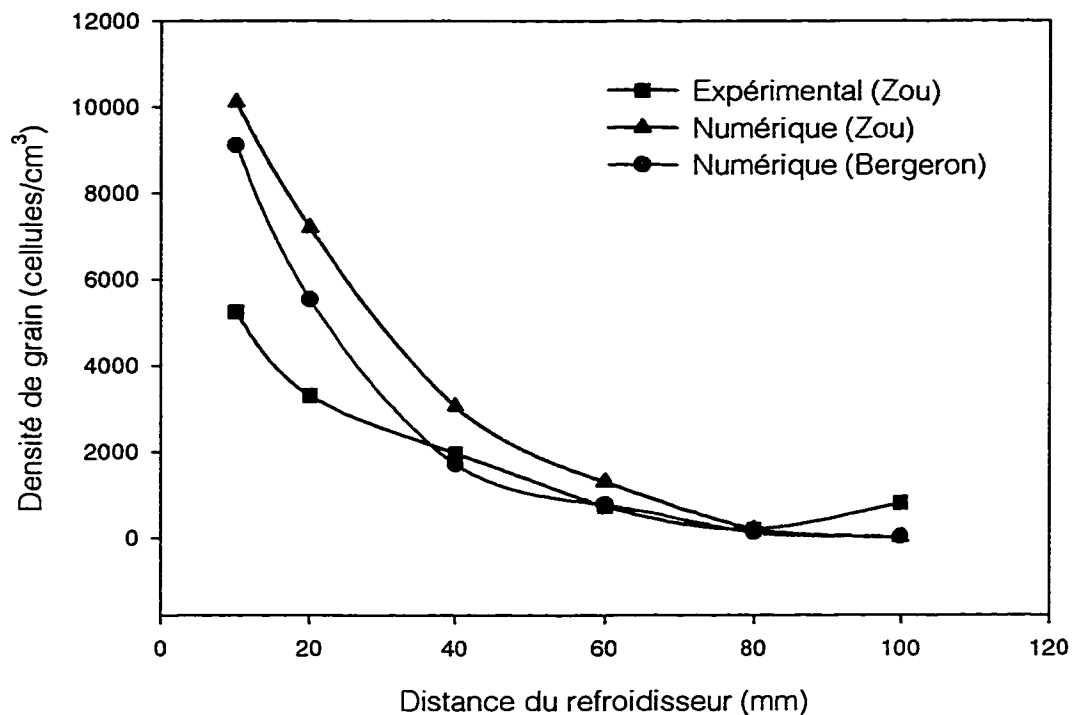


Figure 4.9 Comparaison des résultats - densité de grain

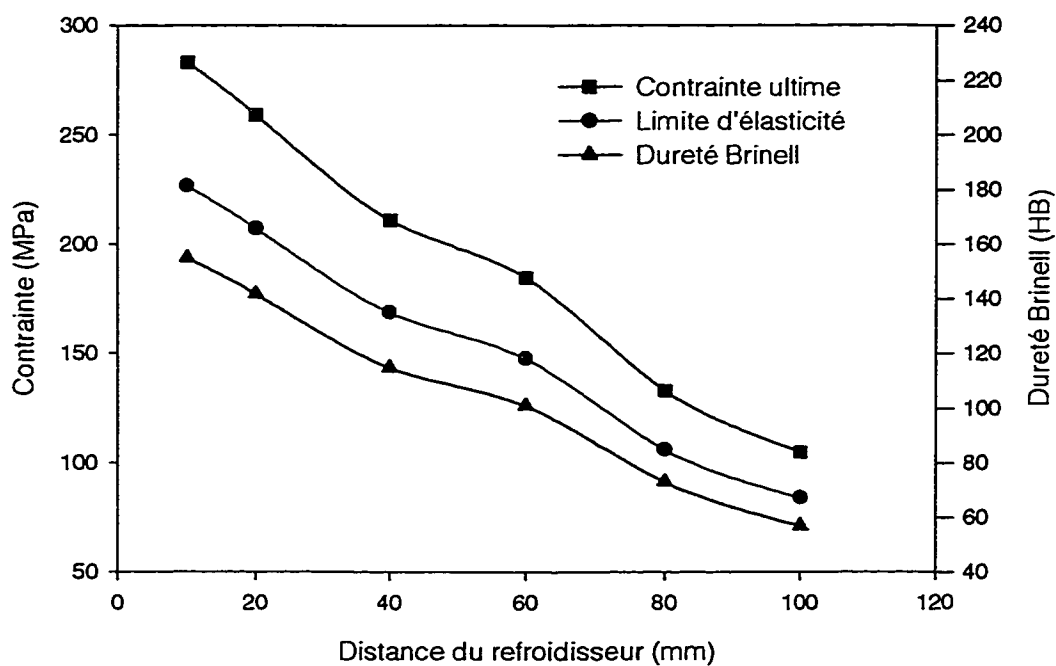


Figure 4.10 Prédiction des propriétés mécaniques

4.2 Cylindres multiples - solidification étagée

Dans cette section, les résultats numériques obtenus à partir d'une pièce moulée au sable comportant plusieurs cylindres de diamètres différents seront présentés (les dimensions sont données à la figure 4.11 et les maillages initiaux aux figures 4.12 et 4.13. Dans le but de comparer les résultats de l'analyse de la solidification avec ceux de Goettsch⁵⁸, un problème bidimensionnel a été considéré.

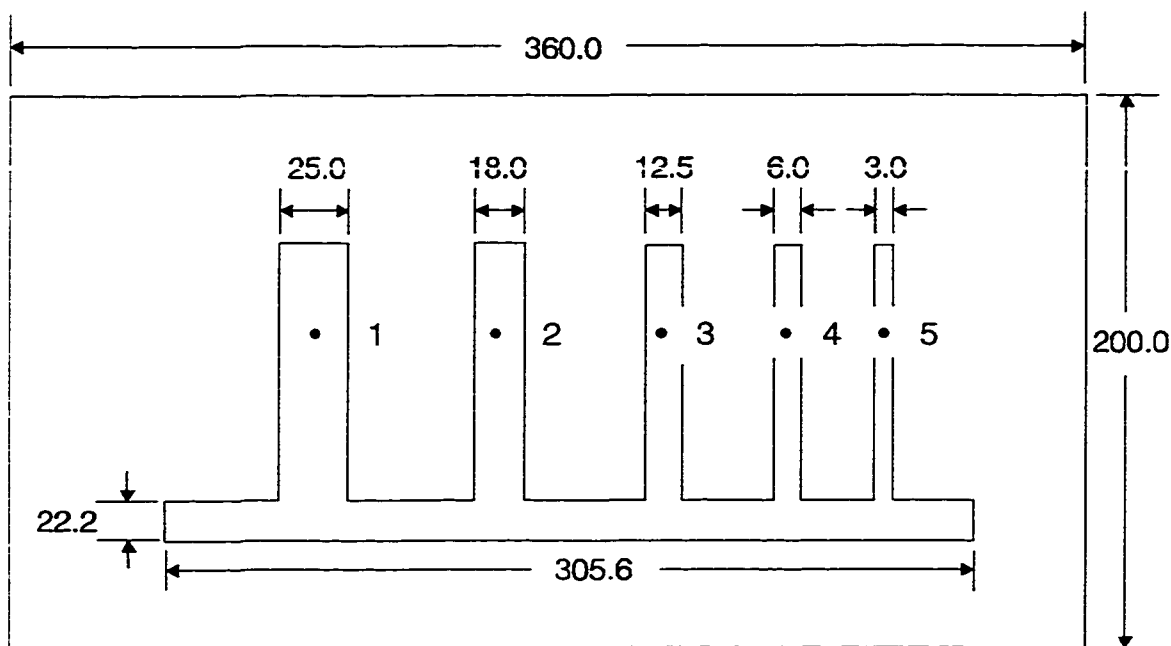


Figure 4.11 Dimensions des composantes pièce-moule pour la solidification étagée

Dans cet exemple, on a utilisé un programme afin de raffiner localement le maillage et ainsi éviter les phénomènes de rebondissements tels que décrits dans cette section. La méthode de découpage des éléments tétraédriques consiste à diviser chacune des arêtes d'un élément. De cette façon, 8 nouveaux éléments seront créés. Deux calculs ont été effectués à partir de maillages

différents: le premier est un maillage grossier afin de déterminer la sensibilité à la taille des éléments et le

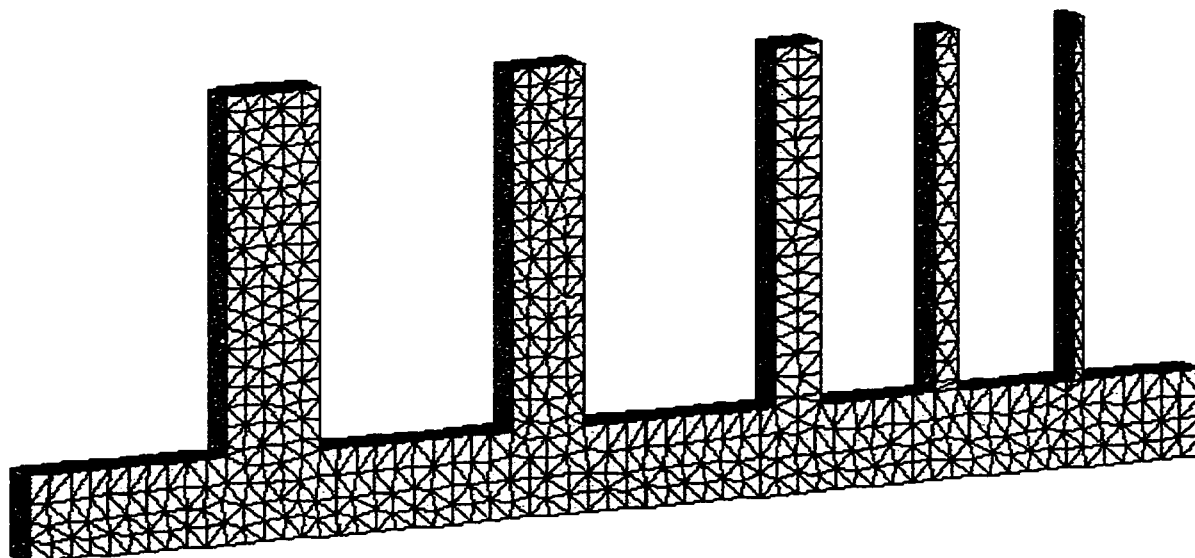


Figure 4.12 Maillage de la pièce en fonte avant le découpage

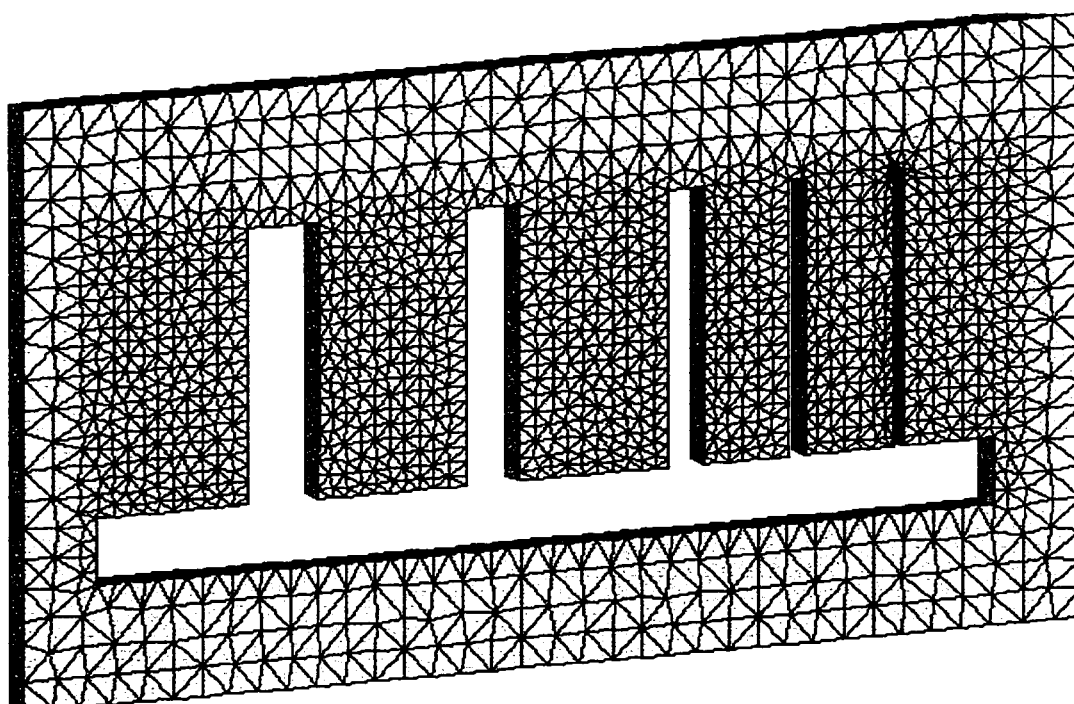


Figure 4.13 Maillage du moule en sable avant le découpage

deuxième est un maillage découpé au niveau de la pièce en fonte dans le but d'accroître le nombre d'éléments dans l'épaisseur. Les caractéristiques des maillages sont données au tableau 4.2.

Tableau 4.2 Caractéristiques des maillages pour la solidification étagée

Maillage	Nombre total d'éléments	Nombre d'éléments dans la pièce	Nombre total de noeuds	Nombre d'éléments à travers l'épaisseur pour les cylindres:
non découpé	8962	2253	3053	1,2: 4 à 5 éléments 3,4,5: 1 à 2 éléments
découpé 1	27528	18024	7347	1,2: 8 à 10 éléments 3,4,5: 2 à 4 éléments

Les températures prédites à partir du maillage grossier sont nettement surévaluées par rapport au maillage raffiné. Après 200 secondes la température est toujours au-dessus du liquidus alors que la solidification est presque terminée dans le cas de l'autre maillage. La modélisation a nécessité près de trois heures sur une plate-forme IBM595 avec un pas de temps de 0.2 seconde pour le maillage de 27000 éléments. Pour cette géométrie, le maillage de 27000 éléments s'avère un bon compromis entre la précision des résultats et le temps requis pour effectuer les calculs.

À la figure 4.14, les courbes de refroidissement sont illustrées pour des éléments situés au centre des cinq cylindres. Sur cette figure, on remarque que les gradients thermiques locaux ne permettent pas la formation de recalescences sur les courbes de refroidissement. Les profils de température après 300 secondes de calcul sont illustrés (voir figures 4.15 et 4.16). On remarque qu'une portion importante de matière demeure non solidifiée après ce temps en

particulier dans la partie inférieure des cylindres. De plus, tel que montré aux figures 4.17 et 4.18, l'évolution des phases en présence peut être suivie par le biais des températures de transformation.

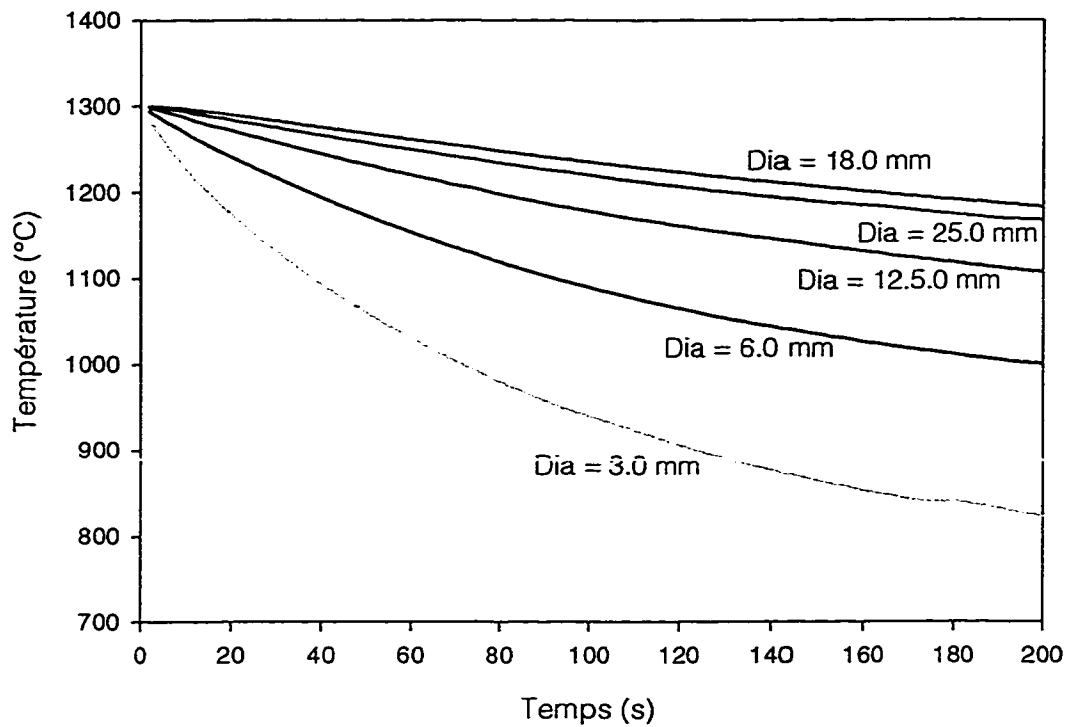


Figure 4.14 Courbes de refroidissement obtenues avec le maillage raffiné
(résultats provenant du centre de chacun des cylindres)

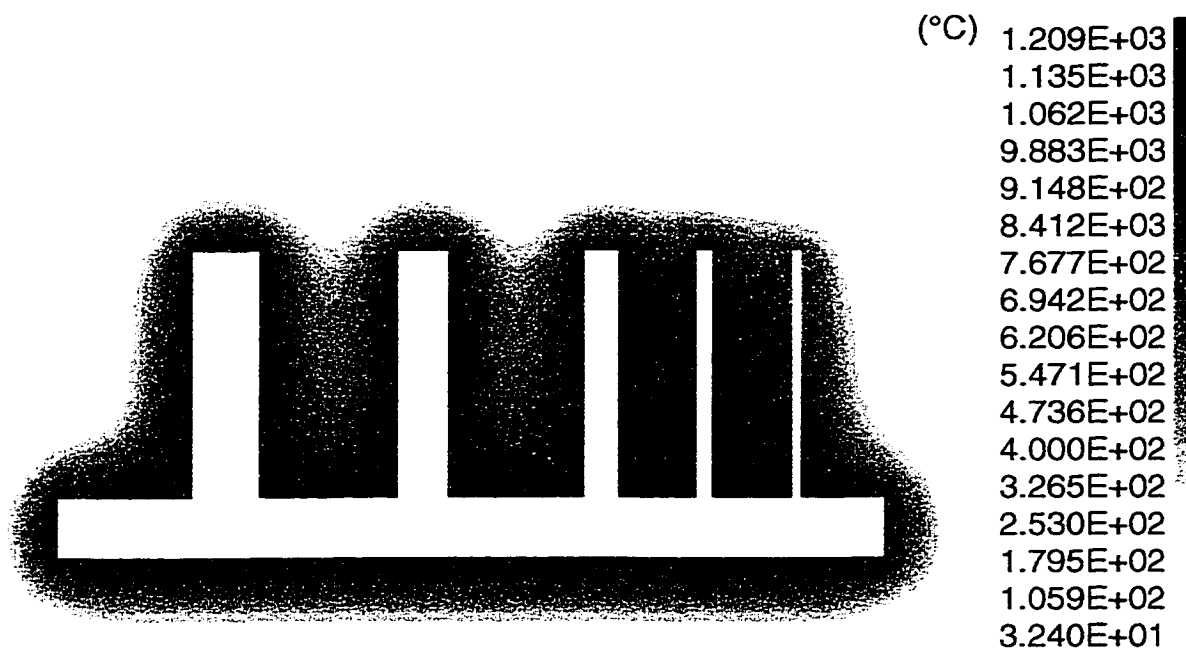


Figure 4.15 Distribution de la température dans le moule après 300 secondes

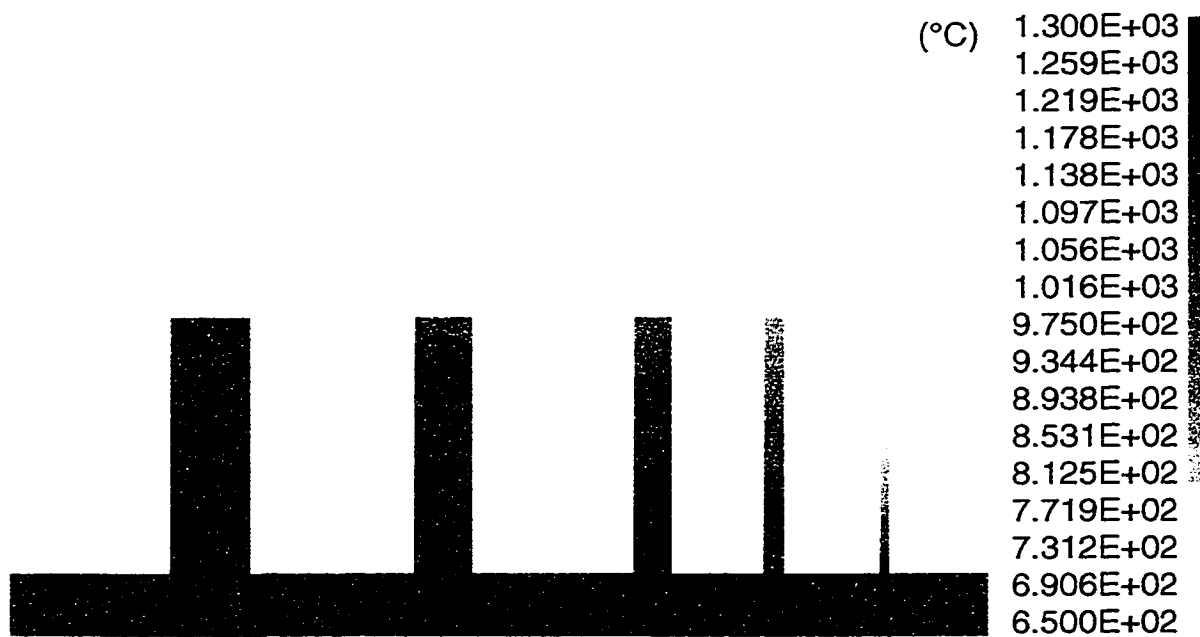


Figure 4.16 Distribution de la température dans la pièce après 300 secondes

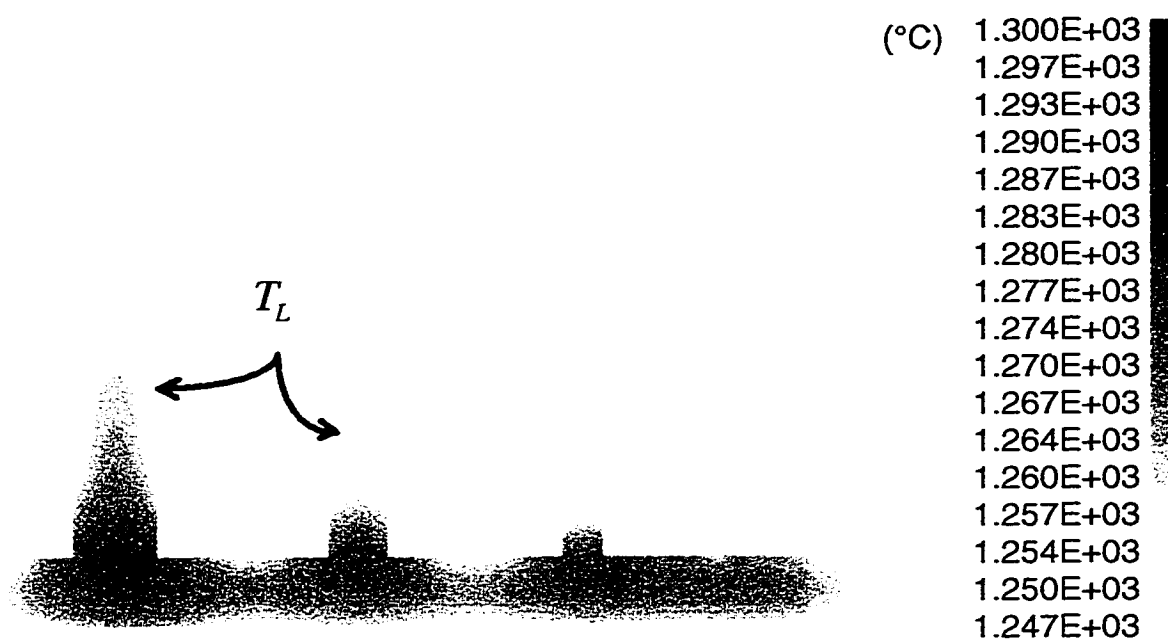


Figure 4.17 Distribution de la température au liquidus après 60 secondes

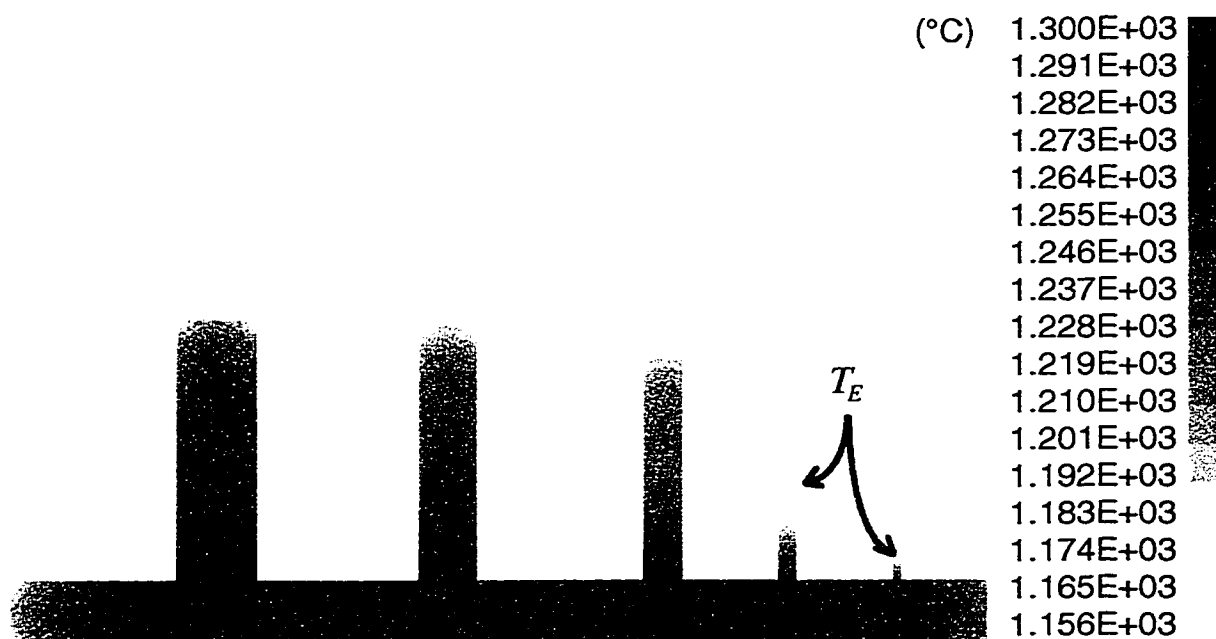


Figure 4.18 Température de transformation à l'eutectique après 60 secondes

En regardant les propriétés mécaniques prédites montrées à la figure 4.19, il est évident que le diamètre des cylindres affecte sensiblement le comportement mécanique du matériau. Ces propriétés étant directement liées à la taille des grains, plus les grains seront fins plus la résistance mécanique et la dureté seront élevées.

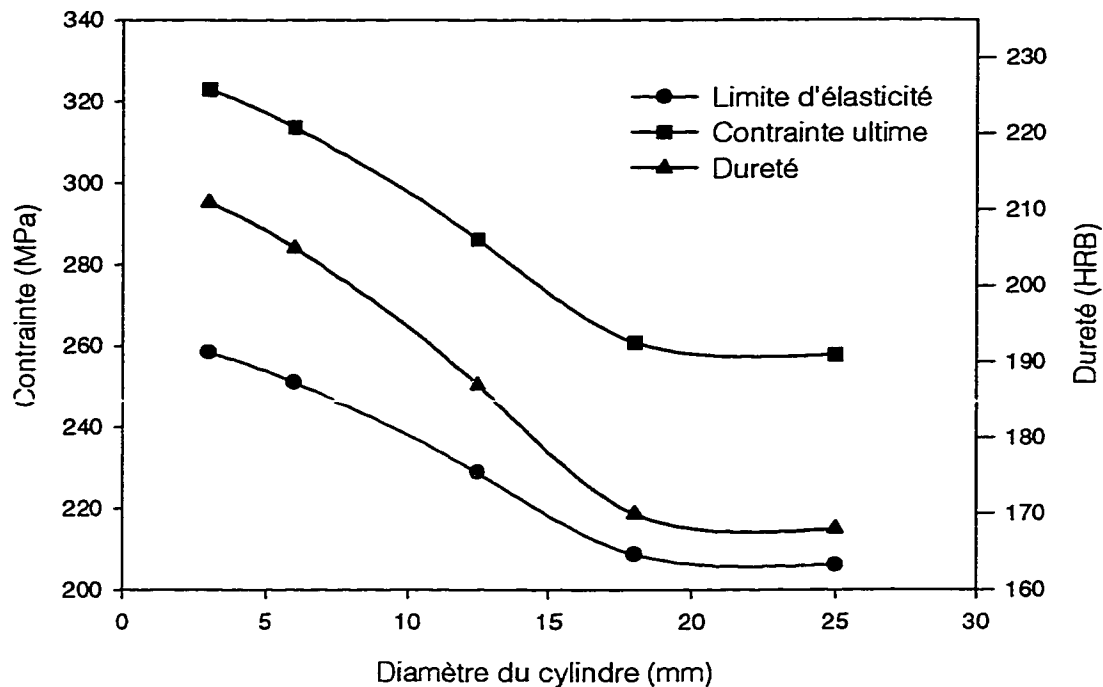


Figure 4.19 Prédiction des propriétés mécaniques pour la solidification étagée (résultats provenant du centre de chacun des cylindres)

Goettsch⁵⁸ *et al.* ont également modélisés les comportements microstructuraux et mécaniques sur cette géométrie. Leurs résultats, comparés aux valeurs prédites (voir tableau 4.3 et 4.4), sont très similaires même si les modèles utilisés sont sensiblement différents. Du point de vue résistance mécanique, les valeurs obtenues sont comparables ce qui laisse présager que les tailles de grains prédites sont justes. Les différences sont surtout reliées à la densité de grain et à la surfusion. Goettsch a modélisé la germination par l'intermédiaire de la loi d'Oldfield (équation (20.)) où la valeur maximum est directement fonction

de la surfusion maximale. Par contre, dans le modèle de Thévoz, la valeur maximale de la densité de grain est fixée lors de la caractérisation (dans ce cas-ci $n_0 = 15$ grains/mm). De plus, Goettsch utilise une approche micro-enthalpique pour le couplage micro/macrosopique donnant ainsi une recalescence en tout point du maillage d'où la différence en terme de surfusion.

Tableau 4.3 Comparaison des propriétés mécaniques prédites avec ceux de Goettsch⁵⁸

Diamètre	$\sigma_{\text{élast}}$		Dureté	
	Bergeron	Goettsch	Bergeron	Goettsch
(unité)	(MPa)		HRB	
25.0 mm	206.2	200	168	158-170
3.0 mm	258.4	280	211	209-222

Tableau 4.4 Comparaison des paramètres microstructuraux avec ceux de Goettsch⁵⁸

Diamètre	n		ΔT	
	Bergeron	Goettsch	Bergeron	Goettsch
(unité)	(mm ⁻³)		(°C)	
25.0 mm	3.98	4.46	26.5	20
3.0 mm	14.9	53.4	44.6	60

Phénomène de rebondissement:

Au niveau microscopique, la méthode de couplage et la taille des éléments sont des facteurs importants sur l'aspect des courbes de refroidissement. Par exemple, des oscillations ou rebondissements peuvent apparaître en relation avec la méthode de couplage micro-macroscopique et la finesse du maillage. Le couplage utilisé dans ces travaux est l'approche du terme source. Contrairement à la méthode micro-enthalpique, la fraction solide et le terme source de l'équation d'énergie sont calculés explicitement à partir de la température au temps t . Ensuite, les nouvelles températures sont calculées au temps $t + \Delta t$.

Dans la méthode micro-enthalpique, les variations d'enthalpie sont calculées implicitement au niveau macroscopique. Le problème des rebondissements vient du fait que les éléments voisins se réchauffent en période de recalescence et provoquent des distorsions sur les courbes de refroidissement. Ce phénomène est d'autant plus important si les mailles sont grossières. Cependant, si la taille des éléments est bien choisie, les résultats sont plus proches de l'expérience comparés à la méthode micro-enthalpique car cette dernière prédit des recalescences en tout point du lingot sans tenir compte du gradient thermique local. Zou²² a également fait état de ce phénomène dans ses travaux. Tel qu'illustré à la figure 4.20, il a trouvé qu'il est nécessaire d'avoir au moins huit éléments le long d'un cylindre unidimensionnel pour éviter les variations dans les courbes de refroidissements et obtenir une précision satisfaisante.

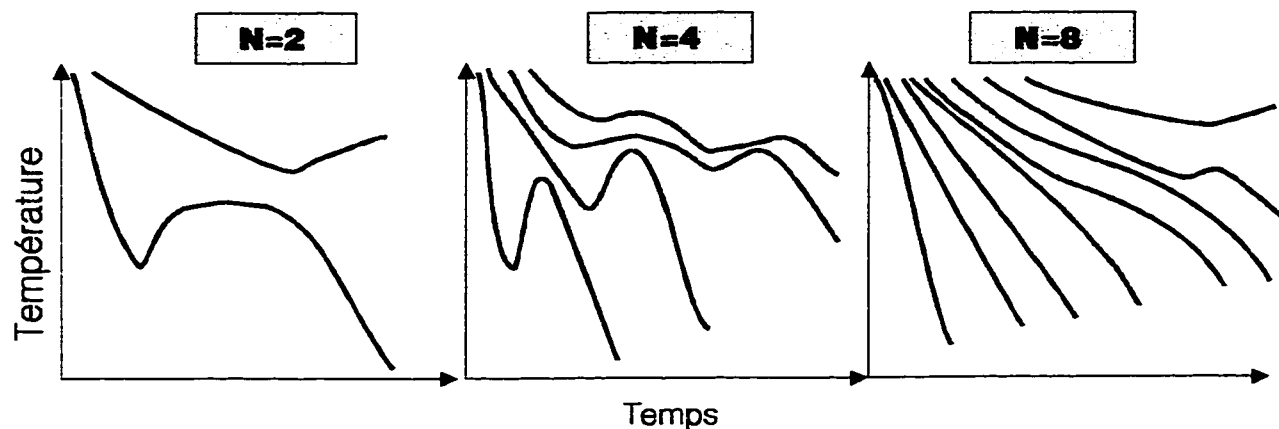


Figure 4.20 Influence de la taille du maillage sur les courbes de refroidissement²⁶

Sensiblement les mêmes tests ont été effectués pour déterminer l'effet de la taille des éléments par rapport à la géométrie de départ. Par exemple, à la figure 4.21, ce phénomène est mis en évidence. Les courbes de refroidissements obtenues pour le cas non raffiné (9000 éléments) et le cas avec des éléments découpés (27000 éléments) sont très différentes. Le maillage grossier présente

des surfusions très surévaluées. De plus, à l'échelle macroscopique, les temps de solidification sont vraiment trop longs. Etant donné que les résultats sont obtenus à partir de paramètres moyens dans l'élément, il est certain que les températures moyennes calculées seront erronées puisqu'il n'y a que un ou deux éléments dans l'épaisseur. Dans le cas du maillage découpé, la taille des éléments a été optimisée afin de réduire au minimum les effets des éléments voisins.

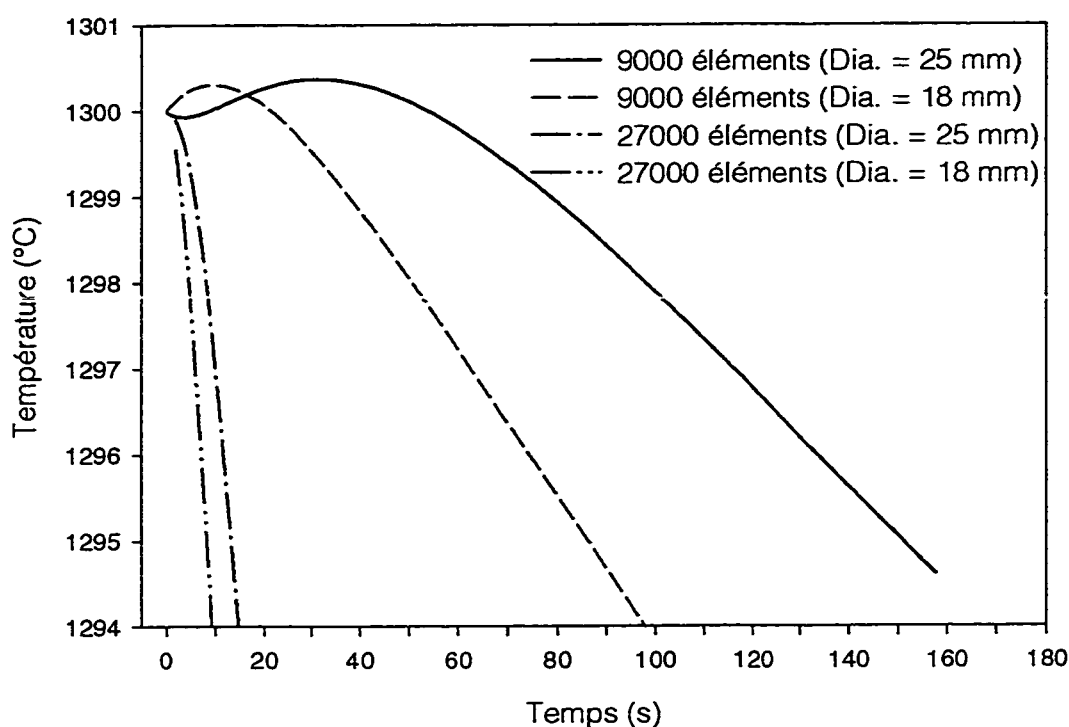


Figure 4.21 Comparaison des résultats avec la taille du maillage
(résultats provenant du centre de chacun des cylindres)

Effet du pas de temps:

L'effet du pas de temps a également fait l'objet de cette étude. Pour une taille de maille donnée, les tableaux 4.5 et 4.6 montrent les différences observées en variant ce paramètre de calcul. Avec $\Delta t = 2.0$ secondes, le premier cylindre

semble avoir une taille de grain identique et même légèrement supérieure au deuxième cylindre. En utilisant un pas de temps dix fois plus petit cet anomalie est corrigée et les résultats sont plus réalistes. Lorsque l'on diminue davantage le pas de temps, la différence n'est plus significative. Un autre fait important à remarquer, les paramètres macroscopiques comme les temps de solidification sont peu affectés par le pas de temps. Ce phénomène est mis en évidence à la figure 4.22.

Tableau 4.5 Résultats calculés à partir du maillage de 27000 éléments
($\Delta t = 2.0$ secondes)

Diamètre	R_g	ΔT	n	$\sigma_{\text{élast}}$	σ_{ultime}	Dureté	t_f
(unité)	(mm)	(°C)	(mm ⁻³)	(MPa)	(MPa)	HRB	(s)
25.0 mm	0.40	26.4	3.80	201	252	164	350
18.0 mm	0.41	26.3	4.41	201	250	163	304
12.5 mm	0.34	30.0	7.54	218	273	178	168
6.0 mm	0.32	36.7	13.31	226	282	184	80
3.0 mm	0.25	41.5	14.73	254	317	207	34

Tableau 4.6 Résultats calculés à partir du maillage de 27000 éléments
($\Delta t = 0.2$ secondes)

Diamètre	R_g	ΔT	n	$\sigma_{\text{élast}}$	σ_{ultime}	Dureté	t_f
(unité)	(mm)	(°C)	(mm ⁻³)	(MPa)	(MPa)	HRB	(s)
25.0 mm	0.381	26.5	3.98	206.2	257.8	168	347.6
18.0 mm	0.372	26.9	4.29	208.6	260.8	170	300.0
12.5 mm	0.309	30.2	7.71	228.8	286.1	187	166.8
6.0 mm	0.258	36.3	13.1	250.9	313.6	205	79.2
3.0 mm	0.243	44.6	14.9	258.4	323.0	211	34.4

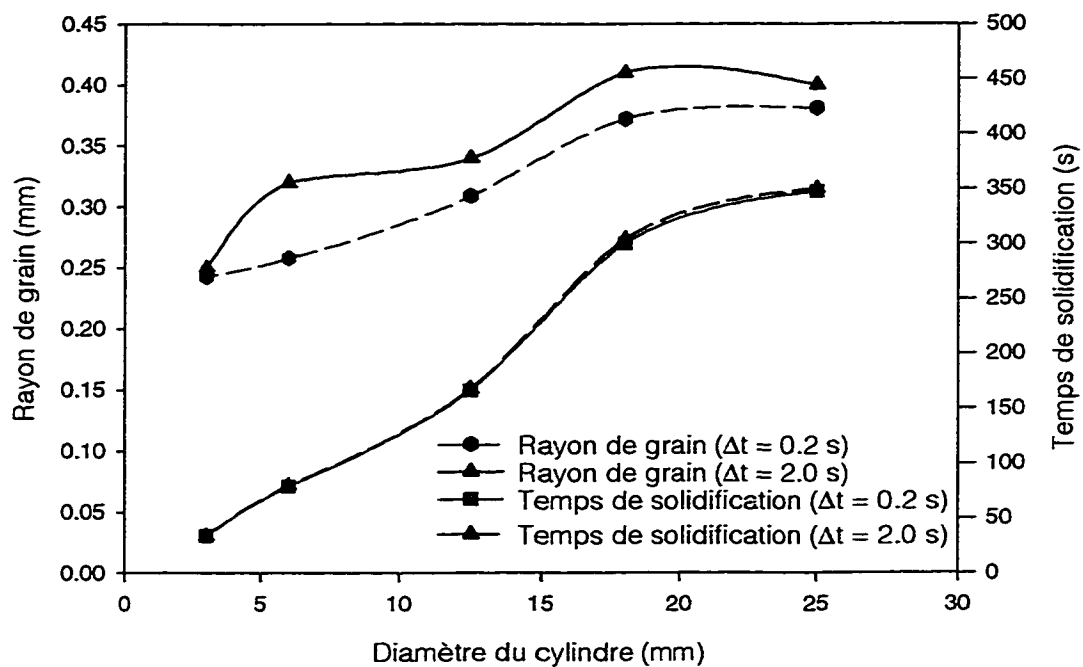


Figure 4.22 Influence du pas de temps sur les paramètres micro/macrosopiques
(résultats provenant du centre de chacun des cylindres)

CONCLUSION

- Une nouvelle combinaison de modèles est proposée afin de modéliser la solidification équiaxe eutectique. Ces modèles sont basés sur les travaux de Goettsch et Dantzig pour la prédiction de l'austénite primaire, de Thévoz *et al.* pour la germination des grains eutectiques et de Zou pour l'empiétement;
- Une revue exhaustive des modèles décrivant la cinétique de transformation des structures équiaxes eutectiques et dendritiques ainsi que les principes de base de la solidification sont donnés;
- Les différentes approches permettant de modéliser la solidification des alliages binaires, pseudo-binaires et à composants multiples sont présentées. En particulier la microségrégation du silicium dans les alliages Fe-C-Si est modélisée;
- Les modèles utilisés pour prédire l'évolution microstructurale requièrent très peu de caractérisation. Dans un premier temps, seulement trois paramètres de germination sont nécessaires;
- L'influence de certains paramètres de calcul et la stabilité du couplage micro/macrosopique ont été examinées. Il a été démontré qu'un maillage comportant de petites mailles permet d'éviter les phénomènes de rebondissement des courbes de refroidissement. Au niveau microscopique, le choix du pas de temps joue un rôle prédominant dans la précision du calcul. En effet, il est important de capter les phénomènes se produisant dans un laps de temps très court comme la germination;
- Outre les paramètres normaux du calcul macroscopique comme la température, la fraction solide, le gradient thermique et les temps de solidification; la modélisation microstructurale des alliages eutectiques permet de prédire entre autre la taille des grains, la vitesse de croissance, la composition du soluté et même les propriétés mécaniques;

- Plusieurs modèles d'empiétement ont été pris en compte. Une étude plus systématique permettrait, de choisir dans quelle situation ces modèles sont applicables;
- Le code microstructural, testé sur trois géométries types, donne des résultats très proches comparés avec des données expérimentales ou numériques provenant de la littérature;
- Concernant la modélisation équiaxe de nombreux travaux restent à faire:
 - Optimisation de la taille du maillage et du pas de temps adéquat pour les calculs microscopiques;
 - Prise en compte des transformations à l'état solide comme la transformation eutectoïde dans les fontes, où l'austénite primaire se transforme en perlite et en ferrite. Ce phénomène est accompagné d'une génération de chaleur causée par le changement de phase et affecte sensiblement les courbes de refroidissement;
 - Le code actuel est assez flexible pour permettre d'ajouter certaines fonctionnalités comme la prise en compte de la transition fonte grise/blanche déterminée à partir de la température d'équilibre Fe-Fe₃C ainsi que la transition structure colonnaire/équiaxe eutectique déterminée à partir des paramètres thermiques;
 - Prise en compte de l'étape du remplissage de la cavité et des autres phénomènes associés comme la germination sur les parois du moule et le détachement des germes lors de l'écoulement;
 - Effectuer une validation plus exhaustive des modèles avec d'autres géométries et des montages expérimentaux;
 - Compléter la modélisation équiaxe dendritique.

RÉFÉRENCES

1. FLEMINGS, M.C. *Solidification Processing*, Materials Science and Engineering Series, 1974, McGraw-Hill, 364 p.
2. VISKANTA, R. *Heat transfer during melting and solidification of metals*, Purdue, University, Journal of heat transfert, nov. 1988, vol.110
3. STEFANESCU D.M., *Methodologies for Modeling of Solidification Microstructure and Their Capabilities*, ISIJ International, Vol.35 (6), 1995, pp. 637-650
4. HENZEL J.G., KEVERIAN J., ASM Trans. 59 (1966) pp.945-959
5. KURZ, W., D.J. FISHER, *Fundamentals of Solidification*, 3^{ième} ed., Trans Tech Publications 1989, 305 p.
6. DORLOT, J.-M, BAÏLON, J.-P, MASOUNAVE, J., 2^{ième} ed., *Des Matériaux*, Édition de l'École Polytechnique de Montréal, 1986, 467 p.
7. DROUZY M., MASCRÉ C., Mém. Et. Scient. Rev., Mét. Vol.68, pp.241-260, 1961
8. BRODY H.D., FLEMINGS M.C., Trans. AIME, Vol.236, pp. 615-624, 1966
9. CLYNE T.W., KURZ W., Metall., Trans., Vol.17A, pp. 2063-2073, 1986
10. NASTAC L., STEFANESCU D.M., Metall. Trans. A, Vol. 24A, p.2107, 1993
11. OLDFIELD, W., *A Quantative Approach to Casting Solidification: Freezing of Cast Iron*, Trans. ASM, 1966, 59, pp.945-959

12. STEFANESCU D.M., TRUFINESCU S., *Zeitschrift Metallkde*, 65 (1974) pp.610-616
13. MAXWELL I., HELLAWELL A., *Acta Met.* 23, (1975), pp. 229-237
14. CORNELISSEN M.C.M., *Mathematical Model for Solidification of Multicomponent Alloys, Ironmaking and Steelmaking*, 13, 1986, pp. 200-212
15. CHARBON CH, RAPPAZ M., *3D Probabilistic Modeling of Equiaxed Eutectic Solidification*, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 1, 1993, pp. 455-466
16. STEFANESCU D.M., PANG H., *Stochastic versus Deterministic Modeling of Solidification*, *Proceedings of the International Symposium on Computational Fluid Dynamics and Heat/Mass Transfer Modeling in the Metallurgical Industry, 35th Annual Conference of Metallurgist of CIM*, pp.164-176, 1996
17. RAPPAZ M., *Solidification Processes: Constitutive Equations and Microstructures*, *Mathematical Modelling for Materials Processings*, 1991, pp.67-91
18. TURNBULL D., FISHER J.C., *J. Chem. Phys.* Vol.17, p.71, 1949
19. TURNBULL D., *J. Chem. Phys.*, Vol.18, pp.198-203, 1950.
20. HUNT J.D., *Materials Sc. Engng.* Vol.65, p.75, 1984
21. KANETKAR C.S., STEFANESCU D.M., *Macro-micro modeling of solidification of hypoeutectic and eutectic Al-Si alloys*, *Trans. AFS* (paper 88-60), 96, pp.591-598, 1988

22. GOETTSCH D.D., DANTZIG J.A., *Modeling Microstructure Developpement in Gray Iron Castings*, Materials Processing in Computer Age, pp. 327-334, 1991
23. THÉVOZ Ph, DESBIOLLES J.L., RAPPAZ M., *Modeling of Equiaxed Microstructure Formation in Casting*, Metallurgical Transaction A Vol.20A February 1989, pp.311-322
24. ZOU J., RAPPAZ M., *Experiment and Modeling of Gray Cast Iron Solidification- PartI: Uniformly Solidified Castings*, Materials Processing in Computer Age, 1991, pp.335-348
25. THÉVOZ Ph., *PhD thesis*, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suisse, No. 765, (1988)
26. ZOU J., *PhD thesis*, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suisse, No. 774, (1988)
27. JACKSON K.A., HUNT J.D., Trans. Amer. Inst. Min. Engng., Vol.236, pp.1129, 1966
28. JONES H., KURZ W., Zeit. Metalkde., Vol.72 p.792, 1981
29. STEFANESCU D.M., KANETKAR C.S., State of the Art of Computer Simulation of Casting and Solidification Processes, Les Editions de Physique, Courtaboeuf, France, p.255, 1986
30. TIAN H., STEFANESCU D.M., Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI, TMS, Warrendale Pa, p.639, 1993
31. DEGAND C., Report: *Influence of the Eutectic Grain Size on Shrinkage in Al-Si Castings*, Solidification Laboratory, The University of Alabama, Tuscaloosa, 1994

32. STEINBACH I., PRIELER R., *A Deterministic nucleation model for equiaxed solidification*, Transport Phenomena in Solidification, ASME, pp. 69-73, 1994
33. BRADLEY F.J. *On Micro-Modeling of Eutectic Ductile Iron Solidification*, Scripta Metallurgica et Materiala, Vol.25, pp.2091-2096, 1991
34. CHIPMAN J., *Metallurgical Transactions*, Vol.3, pp.55-64, 1972
35. LESOULT G., *4th Intl. Conf. on the Phys. Metal. of Cast Iron*, Tokyo, pp. 413-422, 1989
36. STEFANESCU D.M., *Critical Review of the Second Generation of Solidification Models for Castings: Macro Transport-Transformation Kinetics Codes*, Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI, pp. 3-20, 1993
37. NASTAC L., STEFANESCU D.M., *Modeling of Growth of Equiaxed Dendritic Grains at the Limit of Morphological Stability*, Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI, pp. 209-217, 1993
38. RAPPAZ M., THÉVOZ P., *Solute Diffusion Model for Equiaxed Dendritic Growth*, Acta Metall., Vol.35, pp.1487-1497 et pp. 2929-2933, 1987
39. SEKERKA R.F., *Morphological Stability, Crystal Growth*, pp. 403-443, 1973
40. DUSTIN I., KURZ W., *Zeit. Metallkde*, Vol.77, p.265, 1986
41. TRIVEDI R., *Met. Trans.*, Vol.15A, p.977, 1984
42. KATTAMIS T.Z., COUGHLIN J., FLEMINGS M.C., *Trans. Met. Soc. AIME*, Vol.239, p.1504, 1967

43. FEURER U., WUNDERLIN R., *Einfluss der Zusammensetzung und der Erstarrungsbedingungen auf die Dendritenmorphologie binärer Al-Legierungen*, Fachbericht der Deutschen Gesellschaft für Metallkunde, Oberursel, FRG, 1977
44. KIRKWOOD D.H., *Mater. Sci. Enging.*, Vol.73, 1985
45. AVRAMI M., *Kinetics of phase change*, J. Chem. Phys., 1940, 8, pp.212
46. JONHSON W.A., MEHL R.F., *Reaction kinetics in processes of nucleation and growth*, AIME Technical Publ., American Inst. of Mining, Metallurgical and Petroleum Eng., 1939, 5, pp.1089
47. WANG H.P., ZOU J., PERRY E.M., KAISAND L.R. et DOHERTY R., *Micro-Macro Modelling of the Investment Casting of Multi-Component Superalloys*, Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI, pp. 45-53, 1993
48. LIPTON J., GLICKSMAN M.E. et KURZ W., *Metall., Trans.*, Vol.18A, pp. 341-345, 1987
49. VENKATARAMI R., SIMPSON R., RAVINDRAN C., *Microstructural Modeling of Solidification in A356 Alloy*, Materials Characterization, Vol.35, pp.175-194, 1995
50. ZOU J., DOHERTY R., *Micro-Macroscopic Modeling of Solidification and Interdendritic Fluid Flow in DC Cast Al-4.5Cu-1.5Mg Ingots*, Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VI, pp. 193-200, 1993
51. RAPPAZ, M., *Modelling of microstructure formation and solidification processes*, International materials review, 1989, vol.34, No3

52. RAPPAZ, M., *Micro/Macroscopic modeling of solidification processes*, Ecole Polytechnique de Lausanne, 1992
53. POIRIER, D.R. et POIRIER, E.J., *Heat transfert fundamental for metal casting*, Tucson, Arizona, dec. 1991
54. YANG, K.T., *Heat transfer and fluid flow in phase-change systems*, University of Notre Dame
55. CHEN, J.H., TSAI, H.L., *Comparaison on different modes of latent heat release for modeling casting solidification*, University of Missouri-Rolla, Missouri
56. SCIAMA, G., *Simulation de la solidification et du remplissage des pièces coulées, fonderie-fondeurs d'aujourd'hui 100*, dec. 1990
57. UPADHYA, G., PAUL, A.J., *Solidification modeling: a phenomenological review*, 1994
58. GOETTSCH D.D., DANTZIG A.D., *Modeling Microstructure Development in Gray Cast Irons*, Metallurgical and Materials Transactions A, vol 25A, pp. 1063-1079, 1994
59. HEINE R.W., AFS Transaction, vol. 94, pp. 391-402, 1986
60. GLOVER D., BATES C.E., MONROE R., AFS Transaction, vol. 90, pp. 745-757, 1982
61. BATES C.E., AFS Transaction, vol. 94, pp. 889-912, 1986
62. GUNZBURGER M.D., *Finite Element Methods for viscous Incompressible Flows*, Computer Science and Scientific Computing, Academic Press, 1989

ANNEXE A: PROPRIÉTÉS ET PARAMÈTRES UTILISÉS POUR LE CALCUL

Coefficient de croissance:

μ_3 (alliage Fe-C)	3.43e-05 mm/s.°C
μ_3 (alliage Fe-C-Si 2.5%pds)	4.00e-05 mm/s.°C

Paramètres de germination:

n_0	15.0 germes/mm ³
ΔT_N	30.0 °C
ΔT_σ	5.0°C

Propriétés physiques:

L_{aus} (austénite primaire)	263 J/g
L_E (eutectique austénite-graphite)	233 J/g
ρ_{sable}	1.442e-03 g/mm ³
ρ_{fonte}	7.230e-03 g/mm ³
$C_{p,sable}$	1.03 J/g°C
$C_{p,fonte}$	0.91 J/g°C
κ_{sable}	5.0e-02 W/mm°C
κ_{fonte}	1.3e-03 W/mm°C

Paramètres mécaniques:

K_4	146.7 MPa√m
-------	-------------